

بسم الله الرحمن الرحيم



بررسی انرژی گراف در ساختار هیدروکربنهای بنزنی

دانشجو : راحله السادات میرکریمی

استاد راهنما

دکتر صادق رحیمی شعرباف

استاد مشاور

دکتر حسین امینی خواه

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

آذر ماه ۸۸

خداوندا !

تو را سپاس از آن رو که تبعیدی زمینمان کردی... بی فرصت گناه و عصیان، بودن معنی نداشت!

تو را سپاس که می توانم آزادانه در برابر چشمانت گناه کنم! چرا که چشم امیدم بر بخشایش توست.

تو را سپاس که گاهی ناچارم اشک بریزم، تا بیاموزم که لبخندهایم را ارج نهم.

سپاس به خاطر فراموشی، که تلخی ها را از خاطرم محو می کند.

سپاس به خاطر ناتوانی ام، که کمک می کند توانایی ها را فراموش نکنم.

سپاس به خاطر شکست ها و زمین خوردن ها، که دوباره برخاستن را به من می آموزند.

تو را سپاس به خاطر رفتن های بی بازگشت، چرا که در هر رفتنی امید وصالی ابدی است.

سپاس به خاطر همه آن چه که از من دریغ داشتی، چرا که همیشه چیزی هست که به خاطر رسیدن به آن محتاج تکاپو باشم!

سپاس به خاطر زخم هایی که می خورم و بدی هایی که می بینم، از آن رو که می آموزم چگونه دیگری را ببخشایم.

سپاس که گاه می توانم انکار کنم، تا از یاد نبرم که در برابرت تا چه اندازه حقیرم!

خداوندا! تو را سپاس که هستم!

تقدیم به دو گوهر زندگی پدر و مادرم

آنان که بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نامشان دلیلی است بر بودنم،
چرا که این دو وجود پس از پروردگار مایه هستی ام بوده اند؛ دستم را
گرفتند و راه رفتن را در این وادی پر فراز و نشیب زندگی به من آموختند.

آموزگارانی که برایم زندگی؛ بودن و انسان بودن را معنا کردند.

حال این برگ سبزی است تحفه درویش؛ تقدیم آنان....

تقدیر و تشکر

حمد و سپاس پروردگار یکتا را که لطف و کرم بی کرانش اینجانب را نیز در بر گرفت تا به وسع توان خویش گامی کوچک در گستره علم و معرفت بردارم و میسر گشت تا از خرمن دانش و تجربه بزرگان و نیک اندیشان خوشه چینی کرده باشم.

اکنون که به یاری خداوند متعال، این دوره پرخاطره از دوران تحصیلم را به پایان رسانده ام هرچند واژه ها را یارای آن نیست که لطف، محبت و بزرگواری کسانی را که در تمام دوران زندگییم جرعه نوش دریای مهر و محبتشان بوده ام به تصویر بکشم، اما به رسم ادب و احترام بوسه بر دستانشان زده و بر خود واجب می دانم زحمات تمامی اعضای خانواده ام، مخصوصا پدر و مادر مهربانم، که همواره راه گشای مشکلاتم در تمام مراحل زندگی بوده اند ارج نهاده و مراتب تشکر قلبی و باطنی خویش را از الطاف و مهربانی های آنها ابراز دارم. همچنین لازم میدانم که از زحمات فراوان استاد توانمندم جناب آقای دکتر صادق رحیمی شعرباف که با راهنمایی ها و نظرات ارزنده و صبر و حوصله فراوان، نقش مهمی در به ثمر رساندن این کار داشته اند صمیمانه تقدیر و تشکر نمایم، بی تردید انجام این پایان نامه بدون همکاری و راهنمایی ایشان هرگز ممکن نبود. از استاد بزرگواریم آقای دکتر حسین امینی خواه که با تانی مرا در انجام این رساله یاری دادند کمال تشکر را دارم. از آقای دکتر جعفری راد و آقای دکتر نیکوفرد که زحمت مطالعه نقد و داوری کار را بر عهده داشتند نهایت تشکر و قدردانی را دارم. همچنین از اساتید بزرگواری و دوستانم بویژه آقای محمد حبیبی که متحمل زحمات زیادی شدند نهایت سپاسگزاری و امتنان را دارم، و اما مراتب ارادت و سپاس گرم و ویژه خویش را تقدیم آقای احمد حق بین، به خاطر کمک های ارزنده و همه زحماتی که در این مدت متحمل شدند، می کنم، باشد که موجب رضای حضرت حق گردد.

چکیده

یکی از کاربردهای نظریه گراف در علم شیمی، بررسی انرژی گراف های مولکولی می باشد. محققین ریاضی- شیمی انرژی گراف را هم ارز انرژی π - الکترون کلی ساختارهای بنزنی تعریف نموده اند. در این پایان نامه این موضوع مورد بررسی و تحقیق قرار گرفته است و نتایج جدیدترین تحقیقات انجام شده در زمینه انرژی سیستم های بنزنی را از دیدگاه نظریه گراف گرد آوری نموده ایم.

بدین منظور در ابتدا انرژی گراف را بررسی و در قسمت های بعدی ساختارهای بنزنی و خواص توپولوژیکی آنها را معرفی می نماییم. از آنجا که تنوع این سیستم ها زیاد است لذا بررسی انواع آنها کار پیچیده ای می باشد، اما در این کار سعی شده حتی الامکان از هر دسته یک نمونه بررسی شود. این ساختارها به دو دسته کاتاکاندنس و پری کاندنس تقسیم می شوند. که در این مجموعه از دسته اول دو نوع شاخه دار و بدون شاخه را بررسی کرده و برای هر نوع یک رابطه ترتیبی ارائه می شود، و از دسته دوم تنها زنجیرهای شش ضلعی دوگانه را معرفی کرده و رابطه ای ترتیبی برای آنها ارائه می گردد.

اما از آنجا که برای محاسبه انرژی گراف، نیاز به محاسبه مقادیر ویژه داریم و این محاسبات برای گراف های بزرگ کاری سخت و پیچیده است؛ در این مجموعه سعی شده است که روشی ارائه گردد تا با استفاده از آن حجم محاسبات تا حد امکان کاهش یابد، بدین منظور بر نامه ای برای محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی طراحی و یک روش بهینه برای محاسبه انرژی سیستم های متقارن ارائه گردیده است.

کلمات کلیدی: انرژی π - الکترون - ساختارهای بنزنی - سیستم کاتاکاندنس و پری کاندنس -

زنجیرهای شش ضلعی دوگانه - سیستم های شش ضلعی عنکبوتی - سیستم های متقارن

فهرست مطالب

۱	۱. انرژی گراف
۲	۱-۱. مقدمه
۶	۲-۱. انرژی گراف
۸	۳-۱. انرژی لاپلاسین گراف
۹	۴-۱. روابط اولیه در انرژی گراف
۱۱	۵-۱. بررسی روابطی از انرژی لاپلاسین و مقایسه آن با انرژی گراف
۱۴	۲. خواص توپولوژیکی سیستم های بنزنی
۱۵	۲-۱. تعاریف مقدماتی
۱۸	۲-۲. قضایای کاربردی
۲۲	۳-۲. چندجمله ای مشخصه شش گانه سیستم های بنزنی
۲۴	۴-۲. خواص توپولوژیکی و نظریه رزونانس مولکول های NBCCB

۳. انرژی سیستم های شش ضلعی کاتاکاندنس ۳۳

۳-۱. چند جمله ای مشخصه سیستم های شش ضلعی ۳۴

۳-۲. ارائه رابطه ترتیبی برای انرژی سیستم های کاتاکاندنس ۳۸

۴. انرژی زنجیرهای شش ضلعی ۴۶

۴-۱. معرفی زنجیرها ۴۷

۴-۲. زنجیرهای شش ضلعی با کمترین انرژی ۴۹

۴-۲-۱. ارائه روابط ترتیبی ۵۱

۴-۳. زنجیرهای شش ضلعی با بیشترین انرژی ۵۳

۴-۳-۱. ارائه روابط ترتیبی ۵۷

۴-۴. زنجیرهای کاملاً گوشه ای با کمترین انرژی ۶۶

۴-۵. تعمیمی برای زنجیرهای شش ضلعی دوگانه ۷۵

۵. بهینه سازی محاسبه انرژی ۷۷

۵-۱. الگوریتم محاسبه چندجمله ای مشخصه سیستم های بنزنی ۷۸

۵-۲. انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی ۸۲

۵-۲-۱. معرفی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی ۸۲

۵-۲-۲. انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی ۸۴

۵-۳. ارائه روش بهینه برای محاسبه انرژی ۸۸

۵-۳-۱. گراف متقارن و مؤلفه های آن ۸۹

۵-۴. نتیجه گیری و چشم انداز آینده ۹۳

پیوست ۹۴

منابع ۱۲۶

فهرست علائم ۱۲۹

واژه نامه انگلیسی ۱۳۱

واژه نامه فارسی ۱۳۵

فهرست اشکال

۱۷	۱-۲. نمایش سیستم های $P.C$ و $C.C$
۲۵	۷-۲. مدل های اتصال یک هیدروکربن $NBCCB$
۲۵	۸-۲. دنباله $S(G)$
۳۰	۱۲-۲. نمایش یک سیستم $NBCCB$ و درخت وابسته به آن
۴۳	۳-۳. نمایش $ID(G)$
۴۸	۱-۴. زنجیرهای شش ضلعی
۴۸	۲-۴. پیوستن نوع α, β, γ در زنجیرها
۶۷	۷-۴. نمایش مدلهای $B_n^{(n-k)\theta}$
۷۶	۱۰-۴. پیوستن نوع α, β در زنجیر دوگانه
۸۳	۳-۵. سیستم شش ضلعی عنکبوتی
۸۳	۴-۵. سیستم عنکبوتی $S(n_1, n_2, n_3)$
۹۰	۹-۵. نمایش گراف متقارن

فهرست پیوست ها

۹۴ برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های عنکبوتی

فصل اول

➤ انرژی گراف

در این فصل ابتدا تاریخچه ای از اندیس های توپولوژیک و انرژی گراف و ساختارهای بنزنی ارائه داده سپس به معرفی انرژی و انرژی لاپلاسین گراف می پردازیم.

۱-۱. مقدمه

از کاربردهای نسبتاً جدید در نظریه گراف می توان به توسعه دادن رابطه میان ساختارهای شیمیایی و فعالیتهای زیستی اشاره کرد. بدین ترتیب که یک ساختار شیمیایی توسط یک گراف به یک مشخصه عددی توصیف کننده آن ساختار شیمیایی، ترجمه می شود و با این کار بررسی اطلاعات مربوط به ساختار و زیرساختارها آسان تر می شود.

از این نمونه می توان اندیس های توپولوژیک را نام برد. اندیس های توپولوژیک اعدادی هستند که به گراف یک مولکول نسبت داده می شوند. در شیمی اندیس های توپولوژیک متفاوتی تعریف شده است که اولین آنها اندیس وینر است که در سال ۱۹۴۷ توسط شیمیدانی به نام هارولد وینر^۱ برای تشریح بین خواص شیمی- فیزیکی ترکیبات آلی مطرح شد. وی این اندیس را برای تشخیص خواص فیزیکی نوعی از الکانها به نام پارافین به کار برد. وینر اساساً اندیس خود را برای درخت ها مورد استفاده قرار داد و توانست برخی از خواص شیمی- فیزیکی الکل ها، آمین ها و ترکیبات مشابه آنها را به دست آورد. بعدها گوتمن^۲ به شیوه ای دیگر این اندیس را مورد مطالعه قرار داد. وی خصوصاً رابطه اندیس وینر با خواص شیمی- فیزیکی مواد آلی غیر قطبی را مورد بررسی قرار داد. اندیس وینر گراف G را با $W(G)$ نمایش داده و به صورت زیر تعریف می کنیم:

^۱ H. Wiener

^۲ Gutman

تعریف ۱-۱: فرض کنیم G یک گراف همبند باشد، در این صورت اندیس وینر گراف به صورت زیر تعریف می شود، که در آن $d(u, v)$ فاصله دو رأس u, v می باشد. [۱]

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

گوتمن یادآور شد [۱]، با وجود نتایج مهمی که در مورد اندیس وینر به دست آمده است، بعضی از سوالات اساسی هنوز حل نشده اند. برای نمونه یک الگوی کلی برای محاسبه اندیس وینر گراف ها وجود ندارد. یافتن این الگوی کلی در مورد گراف های با چند دور بسیار مهم است، زیرا بسیاری از گراف های مولکولی چند دوری هستند. با ادامه کار روی اندیس وینر، گوتمن به تعریف اندیس دیگری پرداخت که به علت ارائه آن در کنفرانسی در شهر سگد مجارستان به اندیس سگد^۱ معروف شد. این اندیس را با Sz نمایش داده و به صورت زیر تعریف می کنیم [۱]:

تعریف ۱-۲: اگر G یک گراف همبند و $e = uv$ یال دلخواهی از آن باشد، آنگاه اندیس سگد گراف G به صورت زیر تعریف می شود:

$$Sz(G) = \sum_{uv=e \in E} |G_{u,e}| \times |G_{v,e}| \quad (2-1)$$

که در آن $G_{u,e}$ و $G_{v,e}$ عبارتند از:

$$G_{u,e} = \{x | d_G(u, x) < d_G(v, x)\} = \text{مجموعه رئوسی که به } u \text{ نزدیکترند تا به } v$$

$$G_{v,e} = \{x | d_G(v, x) < d_G(u, x)\} = \text{مجموعه رئوسی که به } v \text{ نزدیکترند تا به } u$$

^۱ Szeged

اخیرا شیمیدانی به نام پادماکار خادیکاریک^۱ اندیس توپولوژیکی جدیدی شبیه سگد و وینر معرفی کرده و آنرا اندیس پادماکار-ایوان^۲ یا به اختصار اندیس PI نامیده است. به دلیل اینکه اندیس PI در سالهای اخیر معرفی شده است، کاربرد این اندیس در شیمی به خصوص همبستگی آن با خواص شیمی-فیزیکی مولکول ها زیاد شناخته شده نیست [۱]. این اندیس برای گراف دلخواه G به صورت زیر تعریف می شود:

تعریف ۱-۳: فرض کنید G یک گراف باشد. اندیس PI گراف G را با $PI(G)$ نشان داده و به صورت زیر تعریف می کنیم [۱]:

$$PI(G) = \sum_{uv \in E} [n_{eu}(e|G) + n_{ev}(e|G)] \quad (3-1)$$

که در آن $n_{eu}(e|G)$ تعداد یال هایی می باشد که به u نزدیکترند تا به v و $n_{ev}(e|G)$ تعداد یال هایی است که به v نزدیکترند تا به u .

از دیگر کاربردهای ویژه گراف در علم شیمی محاسبه انرژی گراف می باشد. در شیمی مقدار این انرژی با استفاده از انتگرال کولسن^۳ محاسبه می شود، اما از آنجا که این انتگرال بسیار پیچیده است لذا به دنبال رابطه ای ساده تر برای محاسبه این انرژی می باشند، گوتمن در سال ۱۹۷۸ رابطه ای به مراتب ساده تر برای محاسبه انرژی ارائه داد [۱۵]. در این رابطه مقدار انرژی با استفاده از مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف محاسبه می شود و ثابت شده است که این همان انرژی است که با استفاده از انتگرال کولسن محاسبه می شد [۲].

^۱ Padmakar Khadikar

^۲ Padmakar – Ivan

^۳ Coulson

انرژی لاپلاسین گراف نیز ساختاری مشابه انرژی دارد. در سال ۲۰۰۶ مقاله ای توسط گوتمن و بوژو^۱ ارائه شد که در آن نشان داده شد، تفاوت ها و شباهت های زیادی بین این انرژی و انرژی گراف وجود دارد [۷]، اما رابطه ای که بتوان با اعمال آن مقدار انرژی را با استفاده از انرژی لاپلاسین، که با در نظر گرفتن ماتریس لاپلاسین به جای ماتریس مجاورت تعریف می شود، محاسبه کرد در دسترس نیست. از آنجا که کار کردن با ماتریس لاپلاسین، به خاطر ساختار آن، بسیار ساده تر از ماتریس مجاورت است، لذا بر آن شدیم تا با پیدا کردن رابطه ای بین این دو انرژی محاسبه انرژی گراف را تسهیل نماییم. اما با کمی تحقیق پی بردیم که کار روی ماتریس مجاورت نیز نتایج قابل قبولی در پی خواهد داشت لذا از انرژی لاپلاسین صرف نظر کردیم، تنها تعریف و روابطی از آن را در این فصل خواهیم داشت.

از آنجا که یکی از کاربردهای اصلی انرژی گراف، محاسبه انرژی π - الکترون کلی ساختار های بنزنی (شش ضلعی) است، لذا در این پایان نامه انرژی این ساختارها را مورد بررسی قرار می دهیم.

با توجه به تعاریفی که در مقالات متعدد آمده [۸،۹]، برحسب نوع قرار گرفتن شش ضلعی ها، این سیستم ها به دو دسته کاتاکاندنس و پری کاندنس تقسیم می شوند، که نوع کاتاکاندنس دارای دو زیردسته، شاخه دار و بدون شاخه می باشد، در حالت بدون شاخه نتایج زیادی در دست است. به عنوان مثال، در سال ۱۹۷۷ گوتمن برخی خواص توپولوژیک ساختارهای بنزنی را بیان کرد [۹].

در آنجا نشان داده شد که به جای محاسبه تعداد شش ضلعی های دو به دو رزونانس چنین سیستم-هایی می توان تعداد یالهای مجزای درخت متناظر آنرا محاسبه نمود. به عبارت دیگر در این کار ثابت

^۱ Bo Zhou

شد که چندجمله ای مشخصه شش گانه این سیستم ها به چندجمله ای مشخصه درخت متناظر آن وابسته است، از آنجا که محاسبه تعداد یالهای مجزا به مراتب آسان تر از محاسبه تعداد شش ضلعی-های دو به دو رزونانس است، لذا این کار سرعت محاسبات را افزایش می دهد، لازم به ذکر است که کاربرد این چندجمله ای در محاسبه تعداد ساختارهای ککوله می باشد. همچنین در مقالاتی که در سال ۲۰۰۱ توسط فوجی ژانگ^۱ و زیمالی^۲ و لوشنگ ونگ^۳ ارائه شد، کمترین و بیشترین مقدار انرژی برای این سیستم ها محاسبه شد [۱۶، ۱۸].

در مقاله ای که در سال ۲۰۰۵ توسط جان رادا^۴ ارائه شد تا حدودی انرژی سیستم های کاتاکاندنس شاخه دار بررسی شد و نتایجی قابل توجهی حاصل شد [۱۱]. در سال ۲۰۰۷ نیز مقاله ای ارائه شد که در آن انرژی دسته ای از سیستم های پری کاندنس بررسی شد [۱۹]. در فصل های آینده به ارائه این مطالب و نتایج حاصل از آنها می پردازیم.

۱-۲. انرژی گراف

اگر G یک گراف ساده بدون طوقه و یال دوگانه با n رأس و m یال باشد، آنرا (n, m) -گراف گوئیم. ماتریس $A = A(G)$ را ماتریس مجاورت گراف G می نامیم، این ماتریس یک ماتریس مربعی از درجه n است که درایه (i, j) -ام آن بصورت زیر تعریف می شود که در آن $E(G)$ مجموعه یال های گراف می باشد:

^۱ Fuji Zhang

^۲ Zimao Li

^۳ Lu Shang Wang

^۴ Joan Rada

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & v_i v_j \in E(G) \\ 0 & v_i v_j \notin E(G) \end{cases}$$

در این صورت مقادیر ویژه $A(G)$ ، مقادیر ویژه گراف G می باشند. یک گراف با n رأس، n مقدار ویژه دارد (لزوما همه آنها متمایز نیستند)، آنها را با $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ نشان می دهیم.

چندجمله ای مشخصه $A(G)$ همان چندجمله ای مشخصه گراف G است. بنابراین چندجمله ای مشخصه G یک چندجمله ای از درجه n به صورت زیر می باشد:

$$\varphi(G, x) = \det |xI - A(G)| \quad (4-1)$$

که I ماتریس واحد از درجه n است. مقادیر ویژه گراف فقط صفرهای چندجمله ای مشخصه می باشند. از آنجا که ماتریس مجاورت گراف متقارن است، لذا مقادیر ویژه آن همگی اعداد حقیقی هستند [۳].

برای مقادیر ویژه گراف G قرار می دهیم: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ ، که آنها را طیف گراف G گوئیم [۲].

تعریف ۴-۱: اگر G گرافی با n رأس باشد و $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ مقادیر ویژه آن باشند، آنگاه انرژی گراف از رابطه زیر محاسبه می شود [۲]:

$$E_{\pi}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \quad (5-1)$$

در شیمی انرژی π - الکترون کلی^۲ را می توان با استفاده از انتگرال کولسن به صورت زیر به دست آورد [۴]. گوئمن در مقاله ای ثابت کرد که این دو رابطه با یکدیگر معادلند.

^۱ spectrum of graph

^۲ total π -electron energy

قضیه ۱-۱ (Coulson): اگر G یک گراف با n رأس باشد، آنگاه:

$$E_{\pi}(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[n - \frac{ix \varphi'(G, ix)}{\varphi(G, ix)} \right] dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[n - x \frac{d}{dx} \log \varphi(G, ix) \right] dx \quad (۶-۱)$$

که در آن $\varphi'(G, ix) = (d/dx) \varphi(G, x)$ و $i = \sqrt{-1}$. این فرمول در سال ۱۹۴۰ توسط کولسون معرفی شد.

۳-۱. انرژی لاپلاسین گراف

تعریف ۵-۱: اگر G یک گراف ساده با n رأس m یال باشد، ماتریس لاپلاسین آن را به صورت زیر تعریف می کنیم، و مقادیر ویژه به دست آمده از این ماتریس را مقادیر ویژه لاپلاسین می نامیم:

$$L_{ij} = \begin{cases} d_i & i = j \\ -1 & v_i v_j \in E(G) \\ 0 & v_i v_j \notin E(G) \end{cases}$$

که در آن d_i درجه i امین رأس گراف می باشد.

تعریف ۶-۱: اگر G یک (n, m) -گراف و $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ مقادیر ویژه لاپلاسین آن باشند، آنگاه

انرژی لاپلاسین^۱ آن را با $LE_{\pi}(G)$ نشان می دهیم و داریم [۷]:

$$LE_{\pi}(G) = \sum_{i=1}^n \left| \mu_i - \frac{2m}{n} \right| \quad (۷-۱)$$

که در آن $\frac{2m}{n}$ میانگین درجه رؤس است.

^۱ laplacian energy

مقادیر $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ را طیف گراف G و مقادیر $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ را طیف لاپلاسین گراف گوئیم. اگر d_i درجه i امین رأس باشد، برای مقادیر ویژه و مقادیر ویژه لاپلاسین گراف G روابط (۸-۱) برقرار است [۷]:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda_i = 0, \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m \\ \sum_{i=1}^n \mu_i = 2m, \sum_{i=1}^n \mu_i^2 = 2m + \sum_{i=1}^n d_i^2 \end{cases} \quad (8-1)$$

اگر γ_i برای ماتریس لاپلاسین بصورت زیر تعریف می شود:

$$\gamma_i = \mu_i - \left(\frac{2m}{n} \right) \quad (9-1)$$

برای مقادیر ویژه لاپلاسین روابط (۹-۱) را به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \gamma_i = 0, \sum_{i=1}^n \gamma_i^2 = 2M \\ M = m + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(d_i - \frac{2m}{n} \right)^2 \end{cases} \quad (10-1)$$

برای گراف های منتظم $M = m$ و در غیر این صورت $M > m$ است.

شباهت ها و تفاوت های زیادی بین $E_\pi(G)$ و $LE_\pi(G)$ وجود دارد، به بررسی آنان می پردازیم [۷].

۴-۱. روابط اولیه در انرژی گراف

احکام زیر توسط گوتمن و بوژو اثبات شده است [۷].

۱. همواره داریم: $E_\pi(G) \geq 0$ ، تساوی برقرار است، اگر و تنها اگر، $m = 0$.

۲. اگر گراف G شامل مؤلفه های G_1 و G_2 باشد، آنگاه:

$$E_{\pi}(G) = E_{\pi}(G_1) + E_{\pi}(G_2) \quad (11-1)$$

۳. اگر G_1 یک مؤلفه از گراف G بوده و مؤلفه های دیگر آن رئوس تنها باشند، آنگاه:

$$E_{\pi}(G) = E_{\pi}(G_1) \quad (12-1)$$

۴. همواره داریم: $E_{\pi}(G) \leq \sqrt{2mn}$ ، تساوی برقرار است، اگر و تنها اگر، G گرافی منتظم از درجه صفر یا یک باشد.

۵. رابطه زیر را داریم:

$$E_{\pi}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[2m - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \quad (13-1)$$

تساوی برقرار است، اگر و تنها اگر G یک گراف منتظم از درجه انتظام صفر، یک و یا $n-1$ بوده یا یک گراف منتظم همبند غیر کامل با دو مقدار ویژه غیر بدیهی باشد که هر دو مقدار قدر مطلق زیر را دارند.

$$\sqrt{\left[2m - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right] / (n-1)} \quad (14-1)$$

۶. همواره داریم: $2\sqrt{m} \leq E_{\pi}(G) \leq 2m$ در حالتی که G هیچ رأس تنهایی نداشته باشد،

$E_{\pi}(G) = 2\sqrt{m}$ است، اگر و تنها اگر G یک گراف دوبخشی کامل باشد، و $E_{\pi}(G) = 2m$

است، اگر و تنها اگر G منتظم از درجه یک باشد [۷].

۵-۱. بررسی روابطی از انرژی لاپلاسین و مقایسه آن با انرژی گراف

۱. اگر G منتظم باشد، آنگاه: $LE_{\pi}(G) = E_{\pi}(G)$

۲. با مقایسه تعریف (۶-۱) با نکات قبل در ارتباط با انرژی گراف داریم:

$$\begin{cases} 1) & LE_{\pi}(G) \leq \sqrt{2Mn} \\ 2) & LE_{\pi}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[2M - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \\ 3) & 2\sqrt{M} \leq LE_{\pi}(G) \leq 2M \end{cases} \quad (۱۵-۱)$$

۳. در قسمت (۱) از مجموعه روابط (۱۵-۱) تساوی برقرار است، اگر و تنها اگر G منتظم

از درجه صفر بوده یا شامل α مؤلفه از گراف های کامل از درجه k و $\alpha(k-2)$ رأس تنها

باشد به طوری که $\alpha \geq 1$ و $k \geq 2$.

۴. اگر $p \geq 1$ تعداد مؤلفه های G باشد، آنگاه:

$$LE_{\pi}(G) \leq \frac{2m}{n} p + \sqrt{(n-p) \left[2M - p \left(\frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \quad (۱۶-۱)$$

برای $p=1$ ، اگر G منتظم از درجه صفر، یک و یا $n-1$ بوده یا یک گراف منتظم همبند

غیر کامل با دو مقدار ویژه غیر بدیهی (۱۴-۱) باشد، تساوی برقرار است. برای $p=n$ ،

که G شامل رؤس تنها باشد، ماتریس لاپلاسین آن ماتریس صفر خواهد بود، لذا

$LE_{\pi}(G) = 0$ است. برای سایر مقادیر p ، برای گرافهای شامل α مؤلفه از گراف های

کامل از درجه k و $\alpha(k-2)$ رأس تنها که $\alpha \geq 1$ و $k \geq 2$ است، در صورتی

که $p = \alpha(k-1)$ ، تساوی برقرار خواهد بود [۷].

اگر گرافی که در حالت تساوی (۱۶-۱) صدق می کند، دارای سه مقدار ویژه لاپلاسین مجزا باشد، آنگاه، گراف مذکور ممکن است شامل α_1 مؤلفه از گراف های کامل از درجه k_1 ، α_2 مؤلفه از گراف های کامل از درجه k_2 و β رأس تنها باشد، به طوری که $\alpha_1, \alpha_2 \geq 1$ و $k_1 \geq k_2 \geq 2$ و β یک عدد طبیعی غیرمنفی بصورت زیر است:

$$\beta = \frac{(k_1^2 - 2k_1 - k_1k_2)\alpha_1 + (k_2^2 - 2k_2 - k_1k_2)\alpha_2}{k_1 + k_2} \quad (17-1)$$

اگر $p = 1$ باشد، رابطه (۲) از (۱۵-۱) که حالت خاصی از (۱۶-۱) است به دست خواهد آمد، اگر $p = 0$ را در (۱۶-۱) قرار دهیم، به نامساوی (۱) از (۱۵-۱) می رسیم. بنابراین این مطالب می تواند نشان دهد که سمت راست (۱۶-۱) یک تابع بطور یکنواخت نزولی از p خواهد بود.

سمت چپ نامساوی (۳) در (۱۵-۱) برای هر گراف $G(n, m)$ برقرار است. در آن تساوی برقرار است، اگر و تنها اگر G یک گراف دوبخشی کامل $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$ باشد. برای گراف هایی که رأس تنها ندارند تساوی $LE_\pi(G) = 2M$ برقرار خواهد بود، اگر و تنها اگر G یک گراف منتظم از درجه یک باشد.

این رابطه برای گراف های بدون یال که $LE_\pi(G) = M = 0$ ، برقرار است. بنابراین در ادامه فرض می کنیم که $m > 0$ و در نتیجه $n \geq 2$ است.

۵. برای انرژی لاپلاسین گراف با استفاده از تعریف (۶-۱) داریم $LE_\pi(G) \geq 0$ ، همچنین به راحتی قابل اثبات است که اگر $m = 0$ آنگاه $LE_\pi(G) = 0$ ، لذا اگر G حداقل یک یال

داشته باشد، آنگاه $\gamma_n = -\frac{2m}{n}$ غیر صفر است و در نتیجه $LE_\pi(G) > 0$.

۶. اگر G شامل مؤلفه های G_1 و G_2 باشد که G_1 و G_2 دارای میانگین درجه رأسی مساوی

$$LE_{\pi}(G) = LE_{\pi}(G_1) + LE_{\pi}(G_2) \text{ باشند، آنگاه:}$$

اگر شرط $\frac{2m_2}{n_2} = \frac{2m_1}{n_1}$ برقرار نباشد، آنگاه یکی از روابط زیر برقرار است:

$$LE_{\pi}(G) > LE_{\pi}(G_1) + LE_{\pi}(G_2) \quad ۱.$$

$$LE_{\pi}(G) < LE_{\pi}(G_1) + LE_{\pi}(G_2) \quad ۲.$$

$$LE_{\pi}(G) = LE_{\pi}(G_1) + LE_{\pi}(G_2) \quad ۳.$$

۷. اکنون فرض کنیم که G گرافی به شکل $G(n_1, m)$ (ممکن است شامل $p \geq 1$ مؤلفه

باشد) است که n_2 رأس تنها به آن اضافه شده است. در این صورت داریم:

$$LE_{\pi}(G) = \sum_{i=1}^{n_1-p} \left| \mu_i(G_1) - \frac{2m}{n_1+n_2} \right| + (p+n_2) \frac{2m}{n_1+n_2} \quad (۱۸-۱)$$

اگر n_2 به اندازه ی کافی بزرگ باشد، آنگاه:

$$LE_{\pi}(G) = 4m \frac{p+n_2}{n_1+n_2} < 4m \quad (۱۹-۱)$$

بنابراین در این مورد انرژی لاپلاسیین مستقل از هر ساختار اصلی گراف G است در مجموع

داریم:

$$\lim_{n_2 \rightarrow \infty} LE_{\pi}(G) = 4m \quad (۲۰-۱)$$

(حالت n_2 به اندازه ی کافی بزرگ مسئله باز است) [۷]

فصل دوم

➤ خواص توپولوژیکی سیستم های بنزنی

در این فصل ابتدا به تعریف سیستم های بنزنی می پردازیم و سپس برخی خواص سیستم های بنزنی کاتاکاندنس^۱ را بررسی می کنیم و نشان می دهیم که چندجمله ای مشخصه شش گانه مولکول های بنزنی کاتاکاندنس بدون شاخه^۲ به چندجمله ای مشخصه درخت متناظر آن وابسته است [۹، ۱۰].

۲-۱. تعاریف مقدماتی

از آنجا که می توان هر ساختار مولکولی را به وسیله یک گراف نمایش داد، لذا هر مولکول دارای گرافی می باشد که به گراف مولکولی^۳ آن معروف است و در آن اتم ها معرف رئوس گراف و پیوند بین اتم ها معرف یال های گراف می باشند. این گراف حاوی خواص فیزیکی- شیمیایی مهمی از مولکول می باشد [۱]. یک دسته از ترکیبات مهم در شیمی سیستم های بنزنی^۴ می باشند که با عنوان سیستم های بنزنی شناخته می شوند، از آنجا که ساختار این مولکول ها از تعدادی شش ضلعی منتظم تشکیل شده است، که این شش ضلعی ها به وسیله یال ها به سایر شش ضلعی ها متصل شده اند. لذا این سیستم ها را سیستم های شش ضلعی نیز می نامند [۴]. گراف مولکولی وابسته به این سیستم ها را با B_n نشان می دهیم.

سیستم های بنزنی برحسب نوع قرار گرفتن شش ضلعی ها، به دو دسته کلی کاتاکاندنس و پری-کاندنس^۵ تقسیم می شوند [۸]:

^۱ catacondensed

^۲ non – branched catacondensed benzenoid

^۳ molecular graph

^۴ benzenoid hydrocarbons

^۵ pericondensed

۱. سیستم کاتاکاندنس:

یک سیستم شش ضلعی را کاتاکاندنس گوئیم، هرگاه سیستم رأس درونی نداشته باشد، به عبارت دیگر هر رأس از هر شش ضلعی حداکثر به دو شش ضلعی وابسته باشد. این سیستم ها را با نماد CC نشان می دهند. بنزن یک شش ضلعی واحد است که سیستم بنزنی کاتاکاندنس بدیهی است. این سیستم ها خود به دو زیردسته شاخه دار و بدون شاخه تقسیم می شوند [۸].

I. سیستم CC بدون شاخه:

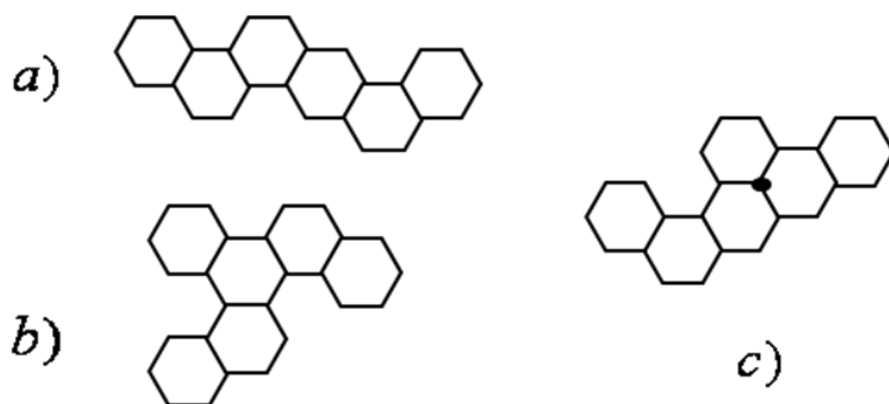
سیستمی است که در آن هر شش ضلعی (بجز شش ضلعی های انتهایی) با دو شش ضلعی دیگر مجاور است، آنرا با نماد $NBCCB$ نشان می دهند [۹]. (شکل ((۱-۲(a))

II. سیستم CC شاخه دار:

سیستمی است که در آن یک یا چند شش ضلعی موجود می باشد که با سه شش ضلعی دیگر مجاور است [۱۰]. (شکل ((۱-۲(b))

۲. سیستم پری کاندنس:

سیستمی است که دارای حداقل یک رأس درونی باشد، یعنی دارای رأسی باشد که وابسته به سه شش ضلعی است، این رأس در شکل مشخص شده است. این سیستم ها را با نماد pC نشان می - دهیم [۸]. (شکل ((۱-۲(c))



شکل (۱-۲). نمایش سیستم های CC و PC

در ادامه بحث ما مفاهیمی از گراف را در تشریح سیستم های مذکور مورد استفاده قرار می دهیم.

تعریف ۱-۲: یک جور سازی در گراف G زیر مجموعه ای از یال هاست به طوری که این یالها دو به-دو مجزا می باشند. جور سازی M در G را کامل گوئیم، هرگاه این جور سازی همه رئوس گراف را دربرداشته باشد.

تعریف ۲-۲: یک جور سازی کامل در گراف G را ساختار ککوله^۱ و گرافی که دارای این ساختار باشد را ککولین^۲ نامیم [۱۰].

تعریف ۳-۲: مدار دنباله ای متناهی به صورت $C = v_1 e_2 v_2 e_3 \dots e_k v_1$ است که جملات آن یک در میان شامل رئوس و یال ها بوده و به ازای $1 \leq i \leq k$ ، v_i و v_{i-1} دو سر یال e_i می باشند، و در آن هیچ یالی تکرار نشده است.

^۱ kekule structure

^۲ kekulean

تعریف ۲-۴: مدار c از گراف B_n را جفت شده (مزدوج)^۱ نامیم، اگر یک جورسازی کامل M از B_n موجود باشد، چنان که یال های c بطور متناوب (یک در میان) در M و متمم آن باشد. اگر این سیستم دقیقاً با یک جورسازی کامل از گراف متناظر باشد، آنرا M - جفت شده می نامیم [۱۰].

تعریف ۲-۵: یک یال از گراف ککولین را ثابت^۲ گوئیم، هرگاه وابسته به هر جورسازی کامل از گراف باشد، یا به هیچ جورسازی کامل از گراف وابسته نباشد. بنابراین یک یال غیر ثابت است، اگر و تنها اگر وابسته به یک مدار جفت شده باشد. سیوین^۳ و گوتمن، ثابت کردند که یک مدار جفت شده در یک سیستم بنزنی دارای طول $4k + 2$ است، که در آن k عددی طبیعی است [۱۰].

تعریف ۲-۶: یک شش ضلعی R از یک سیستم بنزنی B_n رزونانت^۴ است اگر زیر گراف B به دست آمده از حذف رئوس R از گراف، دارای یک جورسازی کامل بوده یا دارای هیچ رأسی نباشد. ثابت شده است که در یک سیستم بنزنی ککولین، هر شش ضلعی یک رزونانت است، اگر و تنها اگر گراف یال ثابت نداشته باشد [۱۰].

۲-۲. قضایای کاربردی:

اگر B_n یک سیستم بنزنی c, c متفاوت از بنزن بوده و R یک شش ضلعی از آن باشد، زیر گراف B به دست آمده از حذف رئوس و یال های وابسته به R (نه هیچ شش ضلعی دیگر B_n) را با $B_n - \{R\}$ نشان می دهیم [۱۰].

^۱ conjugated^۲ fixed^۳ Cyvin^۴ resonant

لم ۲-۱: فرض کنید B_n یک سیستم بنزنی CC بوده و R یک شش ضلعی انتهایی از آن باشد، یعنی تنها با یک شش ضلعی دیگر در ارتباط باشد، آنگاه $B_n - \{R\}$ یک سیستم بنزنی CC است. اگر R بدون شاخه باشد، آنگاه $B_n - \{R\}$ دارای دو مؤلفه همبند است که هر کدام از آنها CC هستند و اگر R شاخه دار باشد، آنگاه $B_n - \{R\}$ دارای سه مؤلفه همبند است که هر کدام از آنها CC هستند [۱۰].

لم ۲-۲: هر شش ضلعی از یک سیستم بنزنی CC ، رزونانت است [۱۰].

اثبات: با استقرا روی تعداد شش ضلعی ها و با استفاده از تعریف بدیهی است.

قضیه ۲-۱: مدار C از یک سیستم بنزنی CC ، جفت شده است.

اثبات: از استقرای ریاضی روی تعداد شش ضلعی ها استفاده می کنیم [۱۰]:

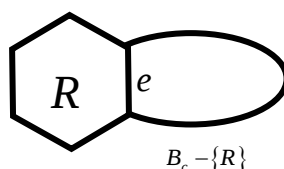
r را تعداد شش ضلعی ها در نظر می گیریم. برای $r = 1$ حکم با استفاده از لم (۲-۲) ثابت می شود. فرض کنیم قضیه برای $r = k$ برقرار باشد، ثابت می کنیم حکم برای $k \geq 1$; $r = k + 1$ درست است.

فرض کنید B_c شامل مدار C ، یک سیستم بنزنی CC باشد. اگر R یک شش ضلعی انتهایی از B_c باشد، آنگاه $B_c - \{R\}$ یک سیستم بنزنی CC است (لم (۲-۱)).

حال فرض کنیم C' یک مدار از $B_c - \{R\}$ باشد، به وضوح C' یک مدار از B_c محصور شده بوسیله k شش ضلعی است. بنابراین با استفاده از فرض استقرا، C' یک مدار جفت شده از B_c است.

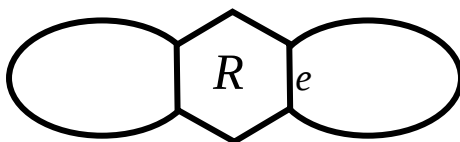
فرض کنید M یک جورسازی کامل از B_c باشد، چنان که یال های c' متناوبا در M و متمم آن باشند. فرض کنید e یالی مشترک بین R و B_c باشد (با این فرض که e در M نیست) همه مدل های ممکن را در نظر می گیریم:

۱. اگر R یک شش ضلعی انتهایی از B_c باشد، با اعمال لم $(2-2)$ ، c ، M - جفت شده است.



شکل (۲-۲)

۲. اگر R یک شش ضلعی خطی باشد، یعنی یال های مجاور با همسایه ها مجزا و موازی باشند، مجددا با اعمال لم $(2-2)$ ، c ، M - جفت شده است.

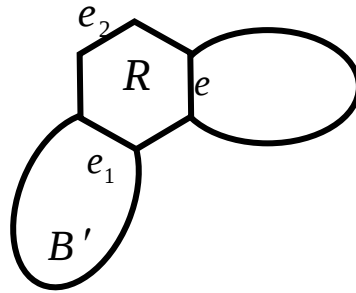


شکل (۳-۲)

۳. اگر R یک شش ضلعی گوشه ای باشد، یعنی یال های مجاور با همسایه ها مجزا و غیرموازی باشند، یال e_1 و e_2 نشان داده شده در شکل وابسته به M باشند، آنگاه c ، M - جفت شده است.

فرض کنید e_1 در M نباشد، سیستم B' را در نظر بگیرید، اگر M' یک جورسازی کامل از مدار معین در B' باشد چنان که $e_1 \in M'$ ، آنگاه M' یک جورسازی کامل از B' است.

بنابراین $(M - E(B')) \cup M'$ جورسازی کامل از B_e است چنان که یال های c متناوبا در آن و متمم آن هستند. بنابراین c یک مدار جفت شده از B_e است.



شکل (۲-۴)

۴. اگر R شاخه دار باشد، فرض کنید e_1 و e_2 در M باشند آنگاه c ، $M -$ جفت شده است.

اگر یکی از e_1 و e_2 در M باشد، می توان نشان داد که c جفت شده است.

حال فرض کنید هیچ کدام از e_1 و e_2 در M نبوده، نشان می دهیم که e' در M نیست.

فرض کنیم e' در M باشد، اگر v یک رأس از B' در تقاطع با e' باشد. توجه کنید

که $V(B') - \{v\}$ یک مجموعه رؤوس از زیر گراف B' است که القایی به

وسیله $M \cap E(B')$ می باشد. از آنجا که تعداد رؤوس B' زوج است، $|V(B') - \{v\}|$

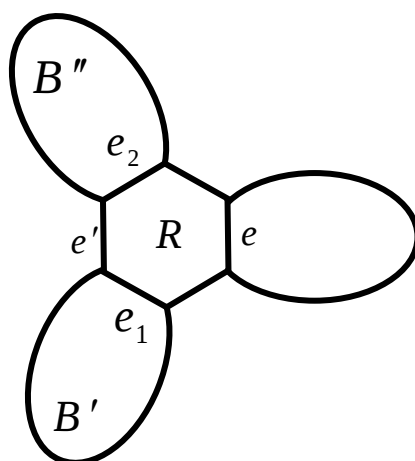
فرد است. M یک جورسازی است بنابراین عدد اصلی مجموعه رؤوس زیر گراف B'

القایی توسط $M \cap E(B')$ زوج است، که این تناقض است. لذا $e' \notin M$.

اگر M' و M'' جورسازی کامل از مدار های تعریف شده (B'', B') باشند، چنان

که $e_1 \in M'$ و $e_2 \in M''$.

مطابق حالت های قبل ثابت می شود که $(M - (E(B') \cup E(B'')))) \cup (M' \cup M'')$ جورسازی کامل از B_c است، چنان که یال های c متناوبا در جورسازی کامل و متمم آن هستند، بنابراین c ، جفت شده است.



شکل (۵-۲)

□

تحقیقات اخیر نشان می دهد که تئوری رزونانس نتایج رضایت بخشی در کاربرد سیستم های بنزنی دارد [۱۱].

۲-۳. چندجمله ای مشخصه شش گانه سیستم های بنزنی

برای سیستم های بنزنی G چندجمله ای مشخصه شش گانه^۱ به صورت زیر تعریف می شود:

$$B_G(X) = \sum_{k=0}^m r(G, k) X^k \quad (۱-۲)$$

^۱ sextet polynomial

که $r(G, k)$ عدد رزونانت شش گانه^۱ نامیده می شود، که تعداد راههایی است که k حلقه شش-ضلعی دو به دو رزونانت از G می تواند انتخاب شود، یعنی سیستم باقیمانده از حذف k حلقه شش-ضلعی دارای جوارسازی کامل باشد. m ماکزیمم تعداد شش ضلعی های دو به دو رزونانت است [۸].

(قرارداد می کنیم: $r(G, 0) = 1$)

اگر مولکول های بنزنی دارای R حلقه باشند، می توان به جای چندجمله ای فوق از فرمول زیر استفاده کرد:

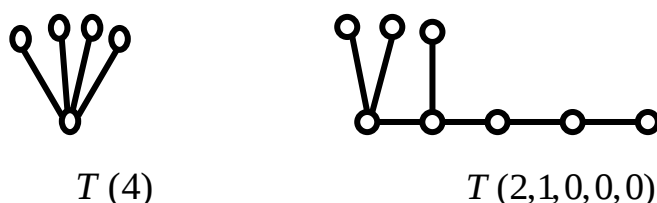
$$BB_G(X) = X^{R+1} B_G(-1/X^2) = \sum_{k=0}^{\lfloor (R+1)/2 \rfloor} (-1)^k r(G, k) X^{R+1-2k} \quad (2-2)$$

از آنجا که در این کار ما با ساختارهای شش ضلعی ای سروکار داریم که دارای R حلقه هستند بنابراین از این فرمول استفاده خواهیم کرد. برای سیستم های NBCCB این چندجمله ای همان چندجمله ای مشخصه درخت است که دارای $R+1$ رأس می باشد [۹]. الگوریتم کاربردی ساده ای برای محاسبه $BB_G(X)$ شناخته نشده است. راه معمولی برای محاسبه $BB_G(X)$ در نظر گرفتن همه انتخاب های ممکن شش ضلعی های رزونانت در G می باشد که روش چندان رضایت بخشی نیست. این روش برای سیستم های چند حلقه ای پیچیده نامعتبر است.

در این قسمت به محاسبه $BB_G(X)$ برای مولکول های NBCCB با تکیه بر چندجمله ای مشخصه درخت T می پردازیم. این درخت براحتی از ساختار شبکه NBCCB نتیجه می شود. پیش از پرداختن به خواص چندجمله ای مشخصه شش گانه، کلاسی از درخت ها را شرح می دهیم.

^۱ resonant sextet number

تعریف ۷-۲: اگر p_n مسیری با n رأس را نشان دهد، درخت $T(t_1, t_2, \dots, t_n)$ درختی است که رأس j ام آن با رأس جدید مجاور است. بنابراین t_j ، صفر یا عددی طبیعی است. چنین درختی را کاتریلار^۱ می نامند. اگر $t_1 = t_2 = \dots = t_n = 0$ آنگاه $T(t_1, t_2, \dots, t_n) = p_n$. تعداد رئوس $T(t_1, t_2, \dots, t_n)$ برابر $N = t_1 + t_2 + \dots + t_n + n$ است.



شکل (۶-۲)

چندجمله ای مشخصه درخت T عبارتست از:

$$p_T(X) = \sum_{k=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} (-1)^k p(T, k) X^{N-2k} \quad (۳-۲)$$

که $p(T, k)$ تعداد راه هایی است که k یال غیرمجاور می تواند از درخت T انتخاب شود. در ادامه ثابت می کنیم که برای هر مولکول NBCCB، دقیقاً یک درخت خاص موجود است چنان که:

$$p_T(X) = BB_G(X) \quad (۴-۲)$$

۴-۲. خواص توپولوژیکی و نظریه رزونانس مولکول های NBCCB

سیستم NBCCB با R حلقه را در نظر بگیرید که $(j=1, \dots, R)$ ، حلقه ها را نشان می دهد.

این حلقه ها به طور متوالی نامگذاری می شوند به طوری که حلقه $R(j)$ با $R(j-1)$ ، $R(j+1)$

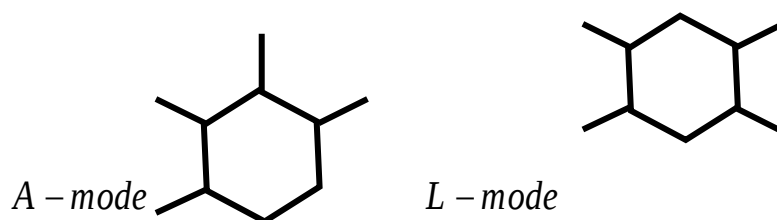
^۱ caterpillar

مجاور است. بنابراین $R(1), R(R)$ حلقه های انتهایی هستند.

یک حلقه در یک مولکول NBCCB را به دو روش می توان به سایر حلقه ها متصل کرد [۹]:

(۱) روش خطی (L)

(۲) روش گوشه ای (A).



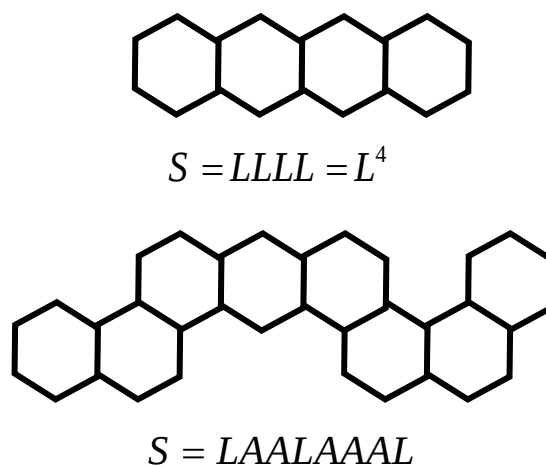
شکل (۷-۲). مدل های اتصال یک حلقه در سیستم NBCCB

بنابراین حلقه $R(j)$ می تواند با S_j نامگذاری شود که S_j یا L است یا A ، حلقه های انتهایی را با L

نامگذاری می کنیم. بنابراین یک دنباله مرتب $S = S(G) = S_1 S_2 \dots S_R$ از A و L خواهیم داشت، که

به سیستم NBCCB وابسته است.

مثال (۱-۲):



شکل (۸-۲). دنباله $S(G)$

شکل عمومی دنباله S عبارتست از:

$$S = (L)^{S_1} A (L)^{S_2} A \dots L^{S_{n-1}} A L^{S_n} \quad (5-2)$$

که S_j ها اعداد طبیعی نامنفی هستند. بعبارت دیگر حلقه های $R(S_1+1), R(S_1+S_2+2), \dots$ از نوع A و بقیه از نوع L هستند [۹].

حال اگر دنباله S را به فرم $(5-2)$ داشته باشیم، آنگاه درخت متناظر با آن به روش زیر حاصل می-شود. ابتدا به هر حلقه از نوع A یک یال افقی از درخت را اختصاص می دهیم و حلقه های نوع L را با توجه به اولین حلقه نوع A وابسته به صورت شاخه به رأس مربوطه متصل می کنیم. در مواردی که دو حلقه از نوع A بلافاصله بعد از هم ظاهر شوند یک رأس از مسیر اصلی را بدون شاخه باقی می-گذاریم [۱۲].

قضیه ۲-۲: برای همه مولکول های $NBCCB$ داریم:

$$p_T(X) = BB_G(X)$$

اگر دنباله S از معادله $(5-2)$ به دست بیاید، آنگاه:

$$T = T(S_1, S_2, \dots, S_n)$$

اثبات: فرض کنید T یک درخت با R یال و $R+1$ رأس باشد، اگر برای هر i, j یال های e_i, e_j دو-به دو غیرمجاور و $R(i), R(j)$ دو به دو رزونانت باشند، آنگاه:

$$P(T, k) = r(G, k) \quad (6-2)$$

بنابراین به جای اثبات قضیه فوق کفایت موارد زیر را اثبات کنیم [۹].

قضیه ۲-۳: اگر $R(i), R(j)$ در G دو به دو رزونانت باشند و $S(G)$ به فرم $(2-5)$ نامگذاری شده باشد، در این صورت یال های گراف $T(S_1, S_2, \dots, S_n)$ را می توان به روشی نامگذاری کرد که هر جفت از یال های e_i, e_j غیرمجاور باشند.

اثبات: حلقه $R(p)$ از G را در نظر بگیرید. دنباله S مربوطه به شکل زیر است:

$$S = \dots A(L)^{a-1} S_p(L)^{b-1} A \dots \quad a, b \in N$$

به عبارت دیگر فرض کنیم که $R(p-a), R(p+b)$ نزدیکترین حلقه های گوشه ای تابانده به $R(p)$ باشند. به راحتی قابل اثبات است که اگر $R(p)$ رزونانت باشد، شش ضلعی های زیر هرگز نمی توانند رزونانت باشند.

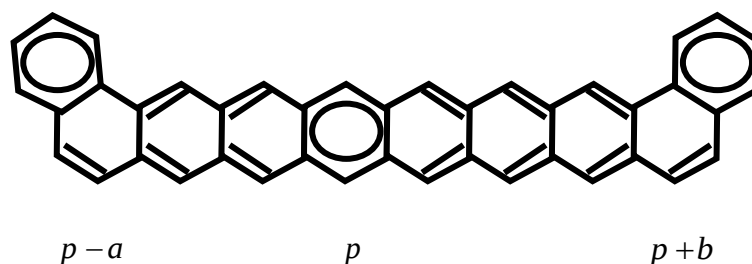
$$R(p-a), \dots, R(p-1), R(p+1), \dots, R(p+b)$$

این به راحتی ممکن است، زیرا بعد از حذف $R(p)$ از G کران های دوگانه (یال های دوگانه)^۱ $R(p-a), \dots, R(p-1), R(p+1), \dots, R(p+b)$ متمرکز می شوند. (شکل (۲-۹))

از آنجا که $R(p)$ حلقه رزونانت است لذا کران های دوگانه در این حلقه ثابت نیستند، بنابراین با جابجایی این کران ها، کران های دو گانه در حلقه های زیر جا به جا می شوند، لذا می گوییم کران-های دو گانه در این حلقه ها متمرکز نیستند:

$$R(1), \dots, R(p-a-1), R(p+b+1), \dots, R(R)$$

^۱ double bound



$$S_p = L, a = 2, b = 3$$

شکل (۲-۹)

لذا وقتی $R(p)$ از G حذف شود، شش ضلعی های $R(i)$ و $R(j)$ دو به دو رزونانت می شوند که در آنها، $j = p+b+1, \dots, R$ و $i = 1, \dots, p-a-1$.

در نتیجه خواهیم داشت:

(I) برای $S_p = A$ ، هر دو شش ضلعی $R(i)$ و $R(j)$ دو به دو رزونانت می باشند.

$$\forall i = p-a+1, \dots, p-1, \quad j = p+1, \dots, p+b-1$$

(II) برای $S_p = L$ ، هیچ دو شش ضلعی $R(i)$ و $R(j)$ دو به دو رزونانت نیستند.

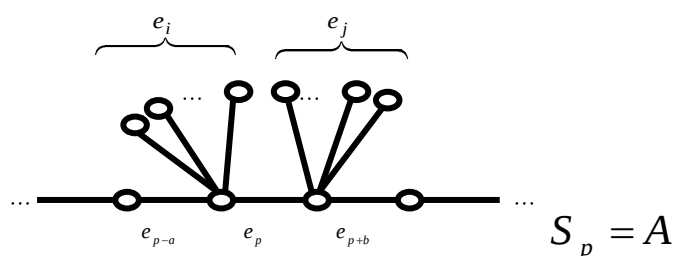
حال با این فرض که حلقه $R(j)$ از G متناظر با یال e_j باشد، درخت T را با خواص مورد نیاز در قضیه (۲-۲) می سازیم، لذا داریم:

(I) اگر $S_p = A$ ، هر دو یال e_i و e_j دو به دو غیرمجاور می باشند، هرگاه

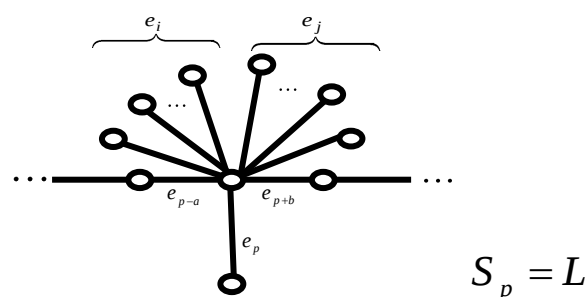
$$\forall i = p-a+1, \dots, p-1, \quad j = p+1, \dots, p+b-1$$

(II) اگر $S_p = L$ ، هر دو یال e_i و e_j دو به دو مجاور می باشند.

به مدلهای زیر توجه کنید:



شکل (۱۰-۲)



شکل (۱۱-۲)

همان طور که مشهود است درخت های نشان داده شده در شکل های (۱۰-۲) و (۱۲-۲) شرایط قضیه را دارند، بنابراین خواهیم داشت:

$$P(T, k) = r(G, k)$$

لذا حکم ثابت است [۹].

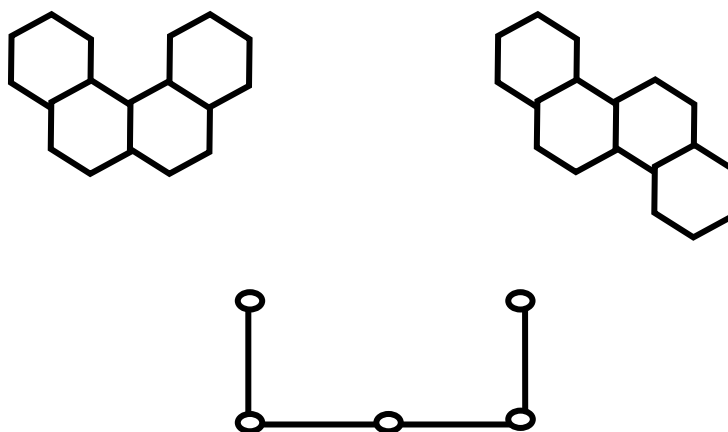
گزاره ۱-۲: هر درخت $T(t_1, t_2, \dots, t_n)$ (وابسته به مولکول NBCCB) را می توان به یک دنباله A, L مربوط نمود. به عنوان مثال، درخت های $T(1, 1, 3, 0, 0, 2)$ و $T(2, 1, 0, 0, 0)$ و $T(4)$ به ترتیب با دنباله های $LALALLLAAALL$ و $LLALAAL$ و $LLLL$ متناظر هستند.

با استفاده از قضیه (۲-۲)، وابسته نمودن درخت T با هر سیستم NBCCB نسبتاً ساده است، به

عنوان مثال درخت متناظر با ۴ شش ضلعی که به صورت خطی به یکدیگر متصل شده اند، $T(4)$

می باشد.

گزاره ۲-۲: اگر دو سیستم $NBCCB$ دارای دنباله $A-L$ یکسان بوده و در نتیجه درخت متناظر با آنها نیز یکسان باشد، از دیدگاه تئوری رزونانس آنها غیرقابل تشخیص اند. کوچکترین مولکول ها که دارای دنباله $LAAL$ با درخت p_5 هستند عبارتند از:



شکل (۲-۱۲). نمایش سیستم $NBCCB$ و درخت وابسته به آن

در نهایت، توجه داریم که درستی قضیه (۲-۱) چه برای مولکول های $c.c$ شاخه دار و چه برای $p.c$ به راحتی قابل اثبات نیست. به عنوان مثال برای کوچکترین مولکول $c.c$ شاخه دار و $p.c$ ، مقادیر $r(G, k)$ متناظر نمی تواند به ضرائب چندجمله ای مشخصه درخت مربوطه وابسته باشد [۹].

کاربرد اصلی نتایج به دست آمده در این فصل در تعیین $BB_G(X)$ مربوط به گرافهای بحث شده می باشد. روشهای ساده معروفی برای محاسبه چندجمله ای مشخصه یک درخت در دست است، بنابراین با توجه به مطالب گفته شده، به راحتی می توان چندجمله ای مشخصه شش گانه یک سیستم $NBCCB$ را به دست آورد.

برای مثال چند جمله ای مشخصه $T(1,0,1)$ و $T(1,0,1,0,1,1)$ و $T(4)$ که به ترتیب با گراف های مولکولی

G_1 و G_2 و G_3 متناظرند، عبارتند از:

$$X^5 - 4X^3, X^{10} - 9X^8 + 26X^6 - 27X^4 + 8X^2, X^5 - 4X^3 + 3X$$

بنابراین از رابطه (۱-۲) داریم:

$$B_{G_1}(X) = 1 + 4X$$

$$B_{G_2}(X) = 1 + 9X + 26X^2 + 27X^3 + 8X^4$$

$$B_{G_3}(X) = 1 + 4X + 3X^2$$

که معادله دوم بدون استفاده از قضیه نسبتا طولانی است.

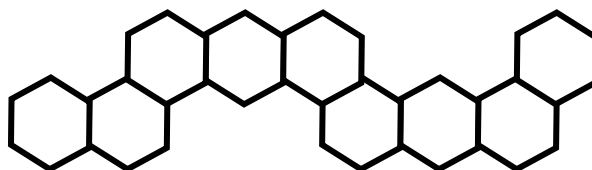
از آنجا که $B_G(1)$ با تعداد ساختار های ککوله، $K = K(G)$ ، گراف G برابر است، لذا از معادلات قبل

داریم [۸،۹]:

$$K(G) = \sum_{k=0}^{[(R+1)/2]} p(T, k) \quad (۷-۲)$$

مقدار K برای مولکول نشان داده شده در شکل (۲-۱۳) با استفاده از شمارش تک تک به سختی

مقدار ۷۱ به دست خواهد آمد.



(شکل ۲-۱۳)

در این فصل برخی خواص توپولوژیکی سیستم های شش ضلعی بررسی شد، در فصل های آینده انرژی این سیستم ها را به طور خاص بررسی خواهیم نمود.

فصل سوم

➤ انرژی سیستم های شش ضلعی کاتاکاندنس

همان طور که گفته شد انرژی گراف G به صورت $E_{\pi}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$ تعریف می شود، که λ_i مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف می باشند. در این بخش انرژی سیستم های CC را بررسی می کنیم، و به عنوان یک نتیجه فرعی یک رابطه ترتیبی را در دسته ای از این سیستم ها به دست می آوریم.

۳-۱. چند جمله ای مشخصه سیستم های شش ضلعی

از آنجا که گراف مربوط به سیستم های بنزنی دارای هیچ دوری به طول فرد نیست، بنابراین این گراف ها دوبخشی هستند [۱۴]، لذا نتایج مربوط به گراف های دوبخشی برای این سیستم ها کاربردی است.

اگر G گرافی دوبخشی باشد، آنگاه چندجمله ای مشخصه آن از رابطه زیر بدست می آید:

$$\varphi(G) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k b(G, k) x^{n-2k} \quad (۱-۳)$$

که n تعداد رئوس G و برای $k = 0, 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$ ، $b(G, k) \geq 0$ ، این بیان برای $\varphi(G)$ یک رابطه شبه ترتیبی روی مجموعه ای از گراف های دوبخشی ارائه می دهد، به این صورت که برای $\varphi(G_1) \leq \varphi(G_2)$ قرار می دهیم: $G_1 \leq G_2$ ، و رابطه $G_1 \leq G_2$ برقرار است، اگر و تنها اگر برای هر $k \geq 0$ ؛ $b(G_1, k) \leq b(G_2, k)$ باشد. همچنین اگر $G_1 \leq G_2$ و k ای موجود باشد چنان که $b(G_1, k) < b(G_2, k)$ ، آنگاه $G_1 < G_2$. همچنین ثابت شده است که [۱۵]:

$$G_1 \leq G_2 \Rightarrow E_{\pi}(G_1) \leq E_{\pi}(G_2) \quad (۲-۳)$$

در بخش (۵-۱) الگوریتمی برای محاسبه چندجمله ای مشخصه مربوط به سیستم های شش ضلعی

آورده شده است [۸].

در شیمی گرمای آزمایشی^۱ از ساختار هیدروکربن های جفت شده بطور بسته به انرژی π - الکترون کلی آن وابسته است. در حقیقت بطور مکرر ادعا می شود که انرژی π - الکترون بسیار متناسب با گرمای آزمایشی مربوط به اجزای جفت شده است [۴]. بنابراین ارائه کمترین و بیشترین مقدار انرژی برای دسته ای خاصی از گراف ها، بسیار مهم است [۴].

در بخش های بعدی کلاسی از سیستم های شش ضلعی با کمترین و بیشترین انرژی را معرفی خواهیم کرد.

همان طور که می دانیم یک سیستم شش ضلعی یک گراف مسطح همبند متناهی بدون رأس برشی می باشد که همه نواحی داخلی آن شش ضلعی های منتظم می باشند.

لم ۳-۱: اگر G یک گراف و uv یالی از آن بوده، $G - uv$ گراف به دست آمده از آن با حذف یال uv می باشد، و $C_{uv}(G)$ و $C_u(G)$ به ترتیب مجموعه دورهای موجود در G شامل uv و u را نشان دهد. روابط زیر برای چندجمله ای مشخصه گراف ثابت شده است [۶]:

$$\varphi(G) = \varphi(G - uv) - \varphi(G - u - v) - 2 \sum_{C \in C_{uv}} \varphi(G - C) \quad (۳-۳)$$

$$\varphi(G) = x \varphi(G - u) - \varphi(G - u - v) - \sum_{w \in N(u) - \{v\}} \varphi(G - u - w) - 2 \sum_{C \in C_u} \varphi(G - C). \quad (۴-۳)$$

که در آن $N(u)$ مجموعه رئوس همسایه u در G می باشند.

^۱ experimental heats

لم ۳-۲: اگر G شامل دو مؤلفه G_1 و G_2 باشد، آنگاه:

$$\varphi_G = \varphi_{G_1} \cdot \varphi_{G_2} \quad (۵-۳)$$

رابطه زیر را بین دو گراف تعریف می کنیم [۱۱]:

اگر G_1 و G_2 دو گراف باشند به طوری که $a_1 b_1 \in G_1$ و $a_2 b_2 \in G_2$ ، با انتخاب یک جهت برای این یال

ها به صورت $\overrightarrow{a_1 b_1}$ و $\overrightarrow{a_2 b_2}$ ، و تلفیق^۱ آنها، دو گراف را ترکیب می کنیم و آن را با نماد

$$G = G_1(\overrightarrow{a_1 b_1}) \cdot G_2(\overrightarrow{a_2 b_2})$$

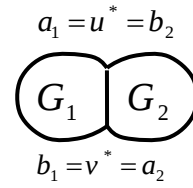
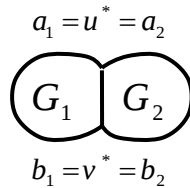
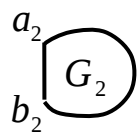
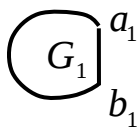
نشان می دهیم. تلفیق یال ها به صورت زیر است. (شکل (۳-۱))

$$V(G) = [V(G_1) - \{a_1, b_1\}] \cup [V(G_2) - \{a_2, b_2\}] \cup [u^*, v^*] \quad (۶-۳)$$

دو رأس از گراف G مجاورند، هرگاه:

در G_1 یا G_2 مجاور باشند یا یکی u^* و دیگری مجاور با a_1 یا a_2 یا یکی v^* و دیگری مجاور با b_1

یا b_2 و یا یکی u^* و دیگری v^* . (شکل (۳-۱))



$$G_1(\overrightarrow{a_1 b_1}) \cdot G_2(\overrightarrow{a_2 b_2})$$

$$G_1(\overrightarrow{a_1 b_1}) \cdot G_2(\overrightarrow{b_2 a_2})$$

شکل (۳-۱)

^۱ identifying

لم ۳-۳: فرض کنید C_6 دوری با ۶ رأس و یال c_1c_2 یالی از آن بوده، و W یک گراف دو بخشی و $st \in W$ یالی از آن باشد که به هیچ دوری به طول $4k$ وابسته نیست. (k عددی طبیعی مثبت) گراف $U = W(\overrightarrow{st}).C_6(\overrightarrow{c_1c_2})$ را می سازیم، حال اگر Z یک گراف دوبخشی دیگر با $uv \in Z$ باشد، که به هیچ دوری به طول $4k$ از Z وابسته نیست، اگر X و Y گراف های تعریف شده به شکل زیر باشند:

$$X = U(\overrightarrow{u_1u_2}).Z(\overrightarrow{vu}) \quad , \quad Y = U(\overrightarrow{u_2u_3}).Z(\overrightarrow{uv})$$

آنگاه داریم:

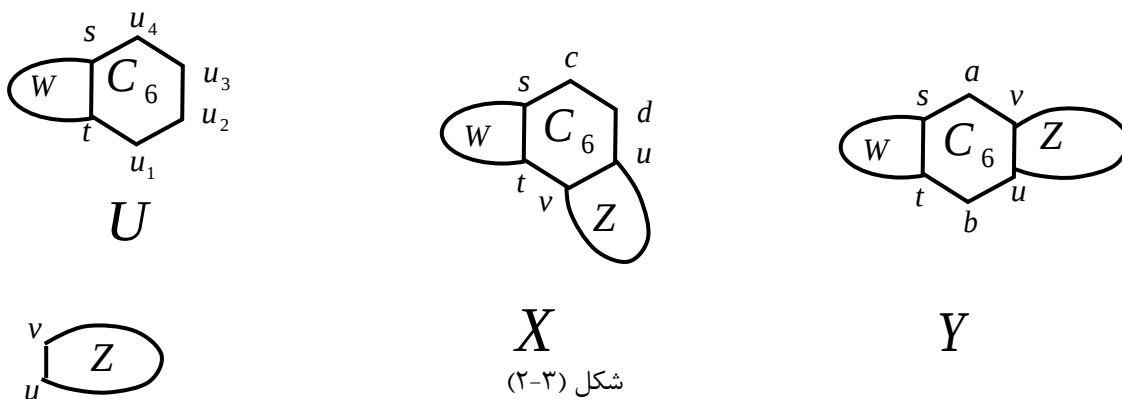
$$\sum_{C \in C_{cd}(X)} \varphi(X - C) = \sum_{C \in C_a(Y)} \varphi(Y - C) \quad (۷-۳)$$

اثبات: تابع دوسویی $\mu: C_{cd}(X) \rightarrow C_a(Y)$ موجود است، چنان که، $\forall C \in C_{cd}(X)$

$$\varphi(X - C) = \varphi(Y - \mu(C)) \text{ داریم:}$$

در واقع اگر C یک دور در $C_{cd}(X)$ باشد، آنگاه $\mu(C)$ دوری از Y است چنان که شامل همان شش

ضلعی های موجود در Z و W بعنوان C می باشد. بنابراین لم ثابت می شود [۱۱]. (شکل (۲-۳)) □



لم ۳-۴: فرض کنید G گرافی دوبخشی با n رأس بوده و u و v دو رأس مجاور از آن باشند. اگر u در هیچ دوری به طول $4k$ نباشد. تعریف زیر را داریم:

$$\psi(x) = \sum_{i=0}^{[n/2]} \psi_i x^{n-2i} = \varphi(G) - x \varphi(G-u) + \varphi(G-u-v) \quad (۸-۳)$$

که $\psi_0 = 0$ ، $\forall i = 1, 2, \dots, [n/2] \quad (-1)^i \psi_i \geq 0$

بنابراین اگر v تنها همسایه نباشد، آنگاه $\psi_1 < 0$ [۱۶].

لم ۳-۵: اگر G و G' دو گراف دوبخشی از درجه n با چندجمله ای مشخصه های زیر باشند.

$$\varphi(G') = \sum_{i=0}^{[n/2]} b'_i x^{n-2i} \text{ و } \varphi(G) = \sum_{i=0}^{[n/2]} b_i x^{n-2i}$$

اگر $\forall i = 1, 2, \dots, [n/2] \quad (-1)^i (b_i - b'_i) \geq 0$ و $b_0 - b'_0 = 0$ آنگاه $G \succeq G'$ ، و اگر $G \succeq G'$ و $i \in \{1, 2, \dots, [n/2]\}$ موجود باشد، به طوری که $(-1)^i (b_i - b'_i) > 0$ آنگاه: $G \succ G'$.

اینک می توانیم نتیجه اصلی را ثابت کنیم.

۳-۲. ارائه رابطه ترتیبی برای انرژی سیستم های کاتاکاندنس

قضیه ۳-۱: فرض کنید Z و W به فرم قبل تعریف شده باشند، اگر X و Y گراف هایی تلفیقی به

فرم $X = U(\overrightarrow{u_1 u_2}).Z(\overrightarrow{vu})$ و $Y = U(\overrightarrow{u_1 u_2}).Z(\overrightarrow{uv})$ باشند، آنگاه $X \succ Y$ و در

نتیجه $E(X) > E(Y)$ [۱۱]. (شکل (۳-۲))

اثبات: روابط موجود برای چندجمله ای مشخصه که قبلا گفته شد و دو لم قبل را برای $\phi(X)$ و

$\phi(Y)$ بیان می کنیم. رابطه (۴-۳) برای $\phi(Y)$ بصورت زیر می باشد.

$$\begin{aligned} \phi(Y) = & x \phi(Y - a) - \phi(Y - a - v) - \sum_{w \in N(a) - \{v\}} \phi(Y - a - w) \\ & - 2 \sum_{C \in C_a} \phi(Y - C). \end{aligned}$$

حال روابط (۴-۳) و (۵-۳) را برای $\phi(Y - a - u)$ و $\phi(Y - a - s)$ و $\phi(Y - a)$ اعمال می کنیم:

$$\begin{aligned} \phi(Y - a) = & x \phi(Y - a - b) - \phi(Y - a - b - u) - \phi(Y - a - b - t) \\ = & x \phi(W) \phi(Z) - \phi(W) \phi(Z - u) - \phi(W - t) \phi(Z). \end{aligned}$$

همچنین:

$$\begin{aligned} \phi(Y - a - v) = & x \phi(Y - a - v - b) - \phi(Y - a - v - b - u) \\ & - \phi(Y - a - v - b - t) = x \phi(W) \phi(Z - v) \\ & - \phi(W) \phi(Z - u - v) - \phi(W - t) \phi(Z - v). \end{aligned}$$

بطور مشابه:

$$\begin{aligned} \phi(Y - a - s) = & x \phi(Y - a - s - b) - \phi(Y - a - s - b - u) \\ & - \phi(Y - a - s - b - t) = x \phi(W - s) \phi(Z) \\ & - \phi(W - s) \phi(Z - u) - \phi(W - s - t) \phi(Z). \end{aligned}$$

از طرف دیگر با استفاده از رابطه (۳-۳) داریم:

$$\varphi(X) = \varphi(X - cd) - \varphi(X - c - d) - 2 \sum_{C \in C_{cd}} \varphi(X - C) \quad ,$$

$$\varphi(X - cd) = \varphi(X - cd - tv) - \varphi(X - cd - t - v) \quad ,$$

$$\begin{aligned} \varphi(X) &= \varphi(X - cd - tv) - \varphi(X - cd - t - v) - \varphi(X - c - d) \\ &\quad - 2 \sum_{C \in C_{cd}} \varphi(X - C) \end{aligned}$$

با بکار بردن روابط (۳-۴) و (۳-۵) برای $\varphi(X - cd - tv)$ و $\varphi(X - cd - t - v)$ داریم:

$$\varphi(X - cd - tv) = (x \varphi(W) - \varphi(W - s))(x \varphi(Z) - \varphi(Z - u))$$

$$\begin{aligned} \varphi(X - cd - t - v) &= (x \varphi(W - t) - \varphi(W - s - t)) \\ &\quad \times (x \varphi(Z - v) - \varphi(Z - u - v)) \end{aligned}$$

در نهایت با استفاده از رابطه (۳-۳) داریم:

$$\begin{aligned} \varphi(X - c - d) &= \varphi(X - c - d - tv) - \varphi(X - c - d - t - v) \\ &= \varphi(W) \varphi(Z) - \varphi(W - t) \varphi(Z - v) \end{aligned}$$

با استفاده از روابط فوق و لم (۳-۳) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \varphi(X) - \varphi(Y) &= -(\varphi(Z) - x \varphi(Z - v) + \varphi(Z - u - v)) \\ &\quad \times (\varphi(W) - x \varphi(W - t) + \varphi(W - s - t)) \end{aligned} \quad (۳-۹)$$

اگر $n(W)$ و $n(Z)$ به ترتیب تعداد رئوس W و Z را نشان دهد، با استفاده از لم (۳-۴) داریم:

$$\sum_{i=0}^{\lfloor n(Z)/2 \rfloor} \psi_i x^{n(Z)-2i} = \varphi(Z) - x \varphi(Z - v) + \varphi(Z - u - v)$$

$$\sum_{i=0}^{\lfloor n(W)/2 \rfloor} \psi'_i x^{n(W)-2i} = \varphi(W) - x \varphi(W - t) + \varphi(W - s - t)$$

که در آنها:

$$\psi_0 = \psi'_0 = 0, \psi_1 < 0, \psi'_1 < 0 \quad , \quad \forall i \geq 2 \quad (-1)^i \psi_i \geq 0 \quad , \quad (-1)^i \psi'_i \geq 0$$

بنابراین:

$$\varphi(X) - \varphi(Y) = \sum_{i=0}^{\lfloor n(Z)+n(W)/2 \rfloor} \gamma_i x^{n(Z)+n(W)-2i}$$

$$\gamma_i = -\sum_{j+k=i} \psi_j \psi'_k \quad \text{که}$$

$$\gamma_0 = \gamma_1 = 0 \quad , \quad \gamma_2 = \psi_1 \psi'_1 < 0 \quad , \quad \forall i \geq 3 \quad (-1)^i \gamma_i \leq 0 \quad \text{بوضوح:}$$

در نتیجه از لم (۵-۳) داریم:

$$X \succ Y$$

لذا با استفاده از رابطه (۳-۲) داریم $E(X) > E(Y)$ [۱۱].

□

اگر G یک گراف باشد و $d(x)$ درجه $x \in V(G)$ و $m_{22}(G)$ تعداد یال های G با رئوس انتهایی از درجه ۲ باشد، و فرض کنیم $\wp$ کلاسی از گراف ها با ماکزیمم درجه ۳ را نشان دهد.

تبصره: فرض کنید G_1 و G_2 دو گراف و $a_1 b_1 \in G_1$ و $a_2 b_2 \in G_2$ باشند، خواص زیر از

$$G = G_1(\overline{a_1 b_1}) . G_2(\overline{a_2 b_2}) \quad \text{براحتی قابل اثبات است [۱۱]:}$$

$$۱. \quad \text{بـا فـرض} \quad d(v^*) = d(b_1) + d(b_2) - 1 \quad , \quad d(u^*) = d(a_1) + d(a_2) - 1$$

اگر $(i=1,2)$ $x_i \in V(G_i) - \{a_i, b_i\}$ ، آنگاه درجه x_i در G همان درجه x_i در G_i است.

۲. فرض کنید $G_1, G_2 \in \wp$ و $(i = 1, 2)$ $a_i b_i \in G_i$ در این صورت:

i. اگر برای $i = 1, 2$ ، $d(a_i) = d(b_i) = 2$ باشد، آنگاه $G \in \wp$.

ii. اگر برای $i = 1, 2$ ، $m_{22}(G_i) \geq 6$ باشد، آنگاه $m_{22}(G) \geq 6$.

تعریف ۳-۱: کلاسی از سیستم های شش ضلعی $\mathcal{CC}$ از درجه h که زیرکلاسی از $\wp$ می باشند را با

نماد $\wp_{6,h}$ نشان می دهیم و به صورت زیر تعریف می کنیم [۱۱]:

$$1. \wp_{6,h} = \{C_6\}$$

$$2. \text{ برای } h \geq 2, \wp_{6,h} = \{G \in \wp : G = G_1(\overrightarrow{a_1 b_1})C_6(\overrightarrow{a_2 b_2})\}, \text{ که در آن}$$

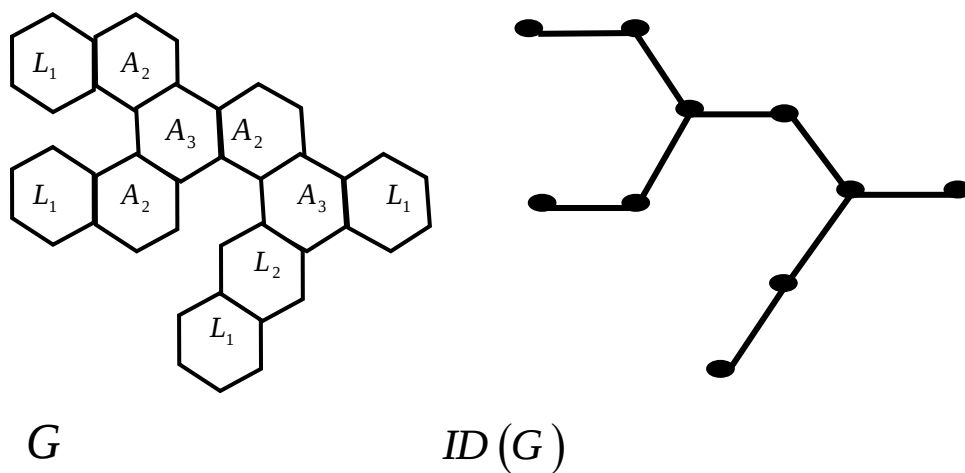
$$G_1 \in \wp_{6,h-1}, \quad a_1 b_1 \in G_1, \quad a_2 b_2 \in C_6, \quad d(a_1) = d(b_1) = 2$$

در چنین مواردی سیستم های شش ضلعی $\mathcal{CC}$ را می توان با توجه به تعداد و وضعیت دوره های مجاور به صورت L_1 و L_2 و A_2 و A_3 کلاس بندی کرد، به این صورت که شش ضلعی را L_1 نامیم، اگر یک شش ضلعی نهایی باشد، و در حالتی که شش ضلعی بدون شاخه است؛ اگر خطی باشد L_2 و اگر گوشه ای باشد A_2 نامیده و اگر شش ضلعی شاخه دار باشد آنرا A_3 می نامیم. اگر $G \in \wp_{6,h}$ تعداد $L_2 - cycles$ و $A_2 - cycles$ و $A_3 - cycles$ را به ترتیب با $I_2(G)$ و $a_2(G)$ و $a_3(G)$ نشان می دهیم.

تعریف ۳-۲: گراف دوگان درونی $G \in \wp_{6,h}$ را با $ID(G)$ نشان می دهیم. به طوری که رئوس

$ID(G)$ دوره ها (شش ضلعی ها) ی گراف و دو رأس $ID(G)$ مجاورند، اگر دوره های مربوطه در G

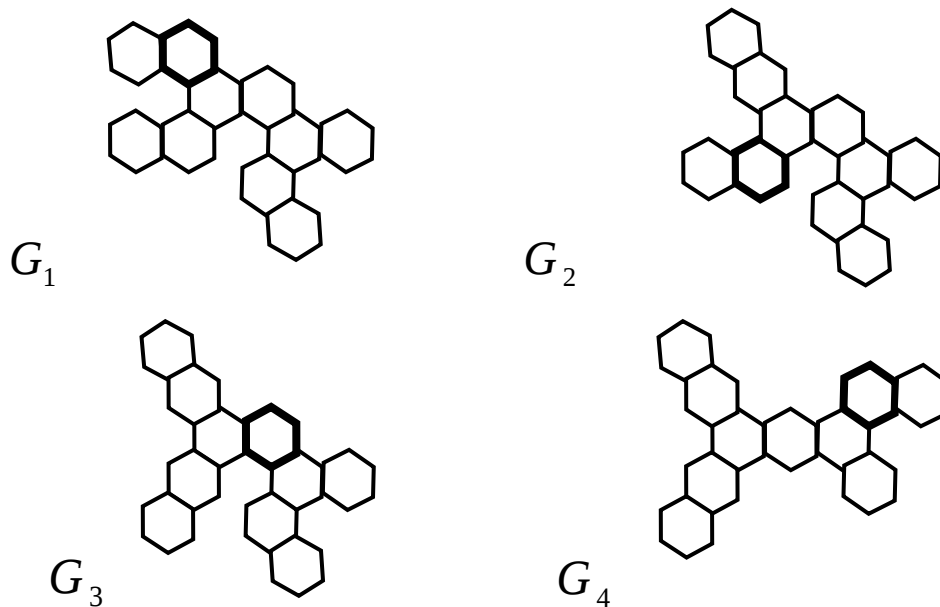
مجاور باشند [۱۱].

شکل (۳-۳). نمایش $ID(G)$

مثال ۳-۱: گراف های نشان داده در شکل (۳-۴) را در نظر بگیرید، با بکار بردن قضیه (۳-۱) برای دور موجود در G_i که با خطوط پررنگ نشان داده شده اند، رابطه ترتیبی زیر بدست خواهد آمد [۱۱].

$$G_1 \succ G_2 \succ G_3 \succ G_4$$

به عبارت دیگر هر چه تعداد شش ضلعی های به فرم A_2 کمتر باشد، انرژی آن سیستم کمتر است.



شکل (۳-۴)

توجه کنید که همه G_i ها گراف دوگان یکسان دارند.

بطور کلی فرض کنید T یک درخت با ماکزیمم درجه ۳، با h رأس

و $\mathcal{O}_T = \{G \in \mathcal{O}_{6,h} : ID(G) \cong T\}$ یک سیستم شش ضلعی $\mathcal{C}$ یکتا در $\mathcal{O}_T$ باشد، چنان

که $IA_T = \{G \in \mathcal{O}_{6,h} : l_2(G) = 0\}$ و $a_2(L_T) = 0$.

در نتیجه بعدی نشان می دهیم که L_T کمترین مقدار انرژی را در $\mathcal{O}_T$ داشته، و بیشترین انرژی

مربوط در IA_T بدست خواهد آمد [۱۱].

نتیجه ۳-۱: اگر T یک درخت با ماکزیمم درجه ۳ باشد:

۱. برای همه $G \in \mathcal{O}_T, G \neq L_T$ داریم: $G \succ L_T$. بویژه کمترین مقدار انرژی در $\mathcal{O}_T$

برای L_T بدست خواهد آمد.

۲. اگر $G \in \mathcal{O}_T, G \notin IA_T$ ، چنان که $A \succ G$ به ویژه بیشترین انرژی

در $\mathcal{O}_T$ برای یک عنصر از IA_T بدست خواهد آمد.

اثبات: با استفاده از قضیه، قسمت اول و دوم نتیجه فوق، به ترتیب با استقرا روی $a_2(G), l_2(G)$

قابل اثبات است [۱۱]. $\square$

به طور ویژه اگر T_0 یک درخت با h رأس باشد، آنگاه یک زیرکلاس از گراف های شش ضلعی از

درجه h بدست می آید:

$$\mathcal{O}_{T_0} = \{G \in \mathcal{O}_{6,h} : a_3(G) = 0\}$$

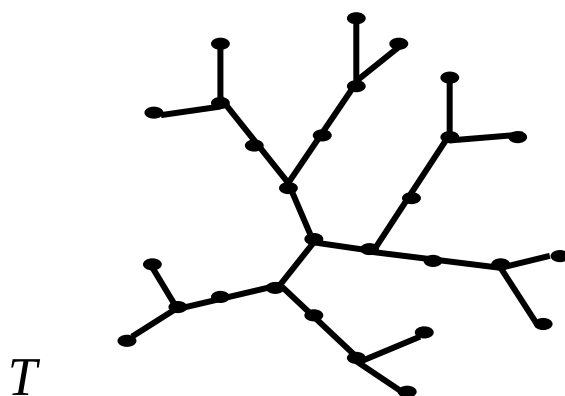
و $L_{T_0} := L_h \in \mathcal{O}_{T_0}$ یک زنجیر خطی با h شش ضلعی می باشد.

نتیجه زیر بوضوح از قسمت اول نتیجه (۱-۳) بدست خواهد آمد.

نتیجه ۲-۳: برای همه $G \in \mathcal{O}_{T_0}, G \neq L_h$ داریم: $G \succ L_h$. بویژه L_h دارای کمترین مقدار انرژی در $\mathcal{O}_{T_0}$ می باشد.

نتیجه فوق یک بیان دیگر از قضیه (۱-۴) فصل شش در مورد سیستم های شش ضلعی می باشد. عملاً، قضیه گفته شده در این فصل برای گراف مسطح سیستم های شش ضلعی cc برقرار است، هرچند نتیجه (۱-۳) برای برخی درخت ها غیرقابل کاربرد است [۱۱].

مثال ۲-۳: درخت نشان داده شده در شکل (۵-۳) را در نظر بگیرید. T یک گراف دوگان درونی از چند سیستم شش ضلعی cc می باشد، که همه آنها دارای شش ضلعی های نوع L_2 و A_2 می-باشند [۱۱].



شکل (۵-۳)

نتیجه ۳-۳: به طور کلی در یک سیستم شش ضلعی کاتاکاندنس هر چه تعداد شش ضلعی ها به فرم A_2 بیشتر باشد، انرژی بیشتر خواهد بود.

فصل چهارم

➤ انرژی زنجیره‌های شش ضلعی

در این فصل ابتدا به معرفی زنجیرها می پردازیم، سپس یک رابطه ترتیبی برای انرژی آنها ارائه داده و در انتها این رابطه را برای زنجیرهای شش ضلعی دوگانه تعمیم می دهیم.

۴-۱. معرفی زنجیرها

یک زنجیر شش ضلعی^۱ یک سیستم شش ضلعی است، که هر شش ضلعی آن با حداکثر دو شش ضلعی دیگر مجاور است. بنابراین زنجیرهای شش ضلعی، سیستم های بنزنی CC بدون شاخه می باشند، که ساده ترین نوع سیستم های بنزنی هستند.

مجموعه زنجیرهای شش ضلعی با n شش ضلعی را با IB_n نمایش می دهیم. اگر $B_n \in IB_n$ ، آنگاه $V_3 = V_3(B_n)$ را مجموعه رئوس درجه 3 در B_n نامیم. بنابراین زیرگراف $B_n(V_3)$ یک گراف بدون دور است.

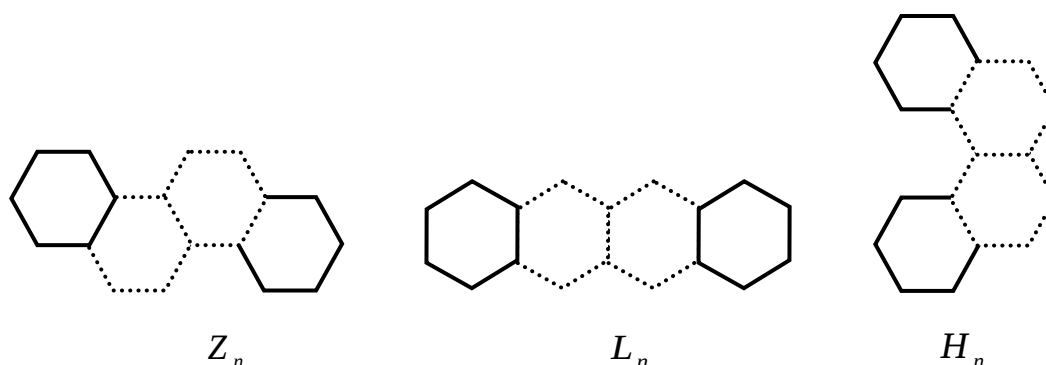
اگر $B_n(V_3)$ یک جورسازی با $n-1$ یال باشد، آنگاه B_n را زنجیر خطی^۲ می نامیم و آن را با L_n نشان می دهیم. اگر $B_n(V_3)$ یک مسیر باشد، آنگاه B_n زنجیر زیگزاگی^۳ است و آن را با Z_n نشان می دهیم و اگر $B_n(V_3)$ یک شانه باشد، آنگاه B_n زنجیر حلقوی^۴ است و آن را با H_n نشان می دهیم [۴]. (شکل (۴-۱))

^۱ hexagonal chain

^۲ linear chain

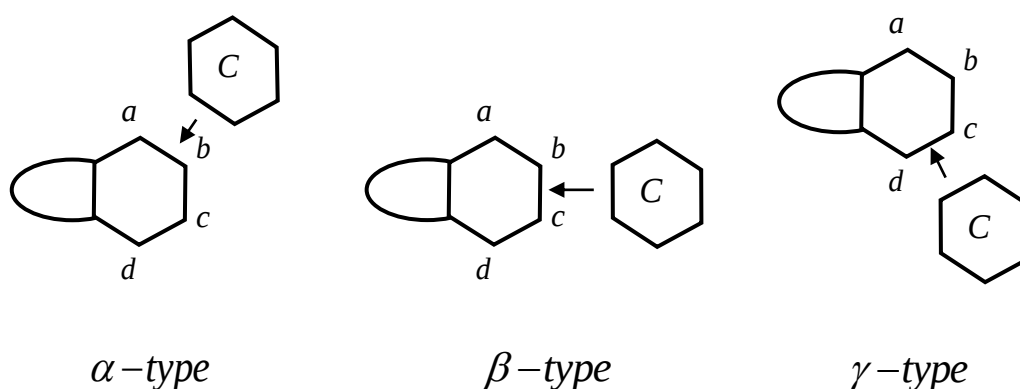
^۳ zig – zag chain

^۴ helicene chain



شکل (۴-۱). زنجیرهای شش ضلعی

هر زنجیر B_n از IB_n را می توان به طور اختصاصی از گراف انتخاب شده از IB_{n-1} به وسیله پیوستن به یک شش ضلعی جدید به دست آورد. اگر B_{n-1} یک زنجیر شش ضلعی و C دوری به طول ۶ (شش ضلعی) باشد، به راحتی قابل اثبات است که سه نوع پیوستن داریم:

شکل (۴-۲). پیوستن نوع α, β, γ

ما آنها را پیوستن از نوع α و β و γ می نامیم. زنجیر به دست آمده از B با پیوستن یک شش ضلعی

θ را با B_θ نشان می دهیم که $\theta \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$ [۴].

به وضوح هر B_n با $n \geq 2$ را می توان به عنوان $\left[\dots \left[\left[L_2 \right]_{\theta_2} \right]_{\theta_3} \dots \right]_{\theta_{n-1}}$ نوشت،

که $\theta_j \in \{\alpha, \beta, \gamma\}$ برای راحتی کار قرار می دهیم:

$$B_n = \beta \theta_2 \theta_3 \dots \theta_{n-1} \quad (۱-۴)$$

عبارت فوق را یک کد برای زنجیر B_n می نامیم. اگر برای هر j ، $\theta_j = \beta$ ، آنگاه $B_n = L_n$ ، اگر $\theta_j = \{\alpha, \gamma\}$ و $\theta_j \neq \theta_{j+1}$ ، آنگاه $B_n = Z_n$ و اگر $\theta_j = \alpha$ یا γ ، آنگاه $B_n = H_n$ [۴].

$$\bar{\theta} = \begin{cases} \alpha & \theta = \gamma \\ \beta & \theta = \beta \\ \gamma & \theta = \alpha \end{cases}$$

زنجیر شش ضلعی $B_n = \beta \theta_2 \theta_3 \dots \theta_{n-1}$ با زنجیر شش ضلعی $\bar{B}_n = \beta \theta_2 \theta_3 \dots \theta_{n-1}$ ایزومورف است. انرژی π - الکترون کلی مولکول جفت شده پلی بین ساختار شیمی و پایداری ترمودینامیکی آن می-باشد. برای این مبحث کران هایی برای انرژی بدست آمده است، که به ارائه آنها می پردازیم [۸].

۲-۴. زنجیرهای شش ضلعی با کمترین انرژی

در این قسمت زنجیرهای شش ضلعی با کمترین انرژی را معرفی می کنیم [۱۶].

لم ۴-۱: اگر G و G' دو گراف دوبخشی از درجه n با چندجمله ای مشخصه های زیر باشند:

$$\varphi(G') = \sum_{i=0}^{[n/2]} b'_i x^{n-2i} \text{ و } \varphi(G) = \sum_{i=0}^{[n/2]} b_i x^{n-2i}$$

اگر $(-1)^i (b_i - b'_i) \geq 0$ ، $\forall i = 1, 2, \dots, [n/2]$ و $b_0 - b'_0 = 0$ آنگاه $G \succeq G'$ ، و اگر $G \succeq G'$ و

$\{i \in \{1, 2, \dots, [n/2]\} \text{ موجود باشد، به طوری که } (-1)^i (b_i - b'_i) > 0\}$ آنگاه: $G \succ G'$ [۴].

لم ۴-۲: فرض کنید:

$$\psi(x) = \sum_{i=0}^{[m/2]} \psi_i x^{m-2i} \text{ و } \psi'(G) = \sum_{i=0}^{[m/2]} \psi'_i x^{m-2i}$$

که $\psi_0 - \psi'_0 = 0$ و $\forall i=1,2,\dots,m \quad (-1)^i \psi_i \geq 0$ و $\forall i=1,2,\dots,m' \quad (-1)^i \psi'_i \geq 0$ در این صورت

$$\Pi(x) = \sum_{i=0}^{[(m+m'-2)/2]} \pi_i x^{m+m'-2-2i} = \psi(x) \psi'(x) \text{ اگر } \pi_i \text{ آنگاه داریم:}$$

$$\pi_0 = 0, \quad (-1)^{i-1} \pi_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq [(m+m'-2)/2]$$

اثبات: با استفاده از تساوی زیر نتیجه حاصل می شود [۱۶]:

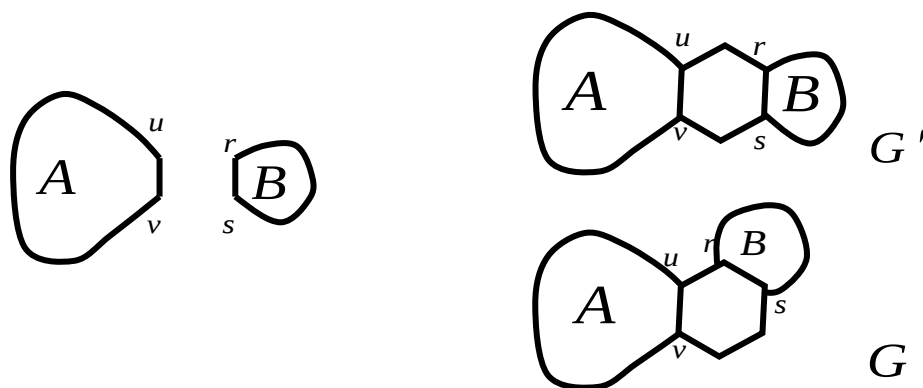
$$\pi_i = \sum_{j=0}^i \psi_j \psi'_{i-j}, \quad i = 0, 1, \dots, \left[\frac{m+m'-2}{2} \right]$$

لم ۳-۴: فرض کنید $A(B)$ یک زنجیر شش ضلعی با دو رأس مجاور $u(r)$ و $v(s)$ باشد،

هر دو از درجه دو باشند. اگر $A-u$ و $A-v$ هم-طیف^۱ بوده و گراف های G و G' ، گراف های نشان

داده شده در شکل (۳-۴) باشند، آنگاه:

$$\begin{aligned} \varphi(G) - \varphi(G') = & -[\varphi(A) - x\varphi(A-u) + \varphi(A-u-v)] \\ & \times [\varphi(B) - x\varphi(B-r) + \varphi(B-r-s)]. \end{aligned} \quad (۲-۴)$$



شکل (۳-۴)

۴-۲-۱. ارائه روابط ترتیبی:

قضیه ۴-۱: فرض کنید B_n یک زنجیر شش ضلعی با n شش ضلعی باشد، اگر $B_n \neq L_n$ آنگاه:

$$E(B_n) > E(L_n) \quad (۳-۴)$$

اثبات: باید ثابت کنیم L_n کوچکترین عنصر منحصر به فرد در میان زنجیرهای شش ضلعی با n شش ضلعی می باشد.

فرض کنید B_n یک زنجیر متمایز از L_n با کد $\theta_1\theta_2\cdots\theta_{n-1}$ است و θ_i اولین عنصر کد می باشد چنان که $\theta_i \neq \beta$. دو حالت زیر را در نظر می گیریم:

۱. $\theta_i = \alpha$ ، اگر B'_n زنجیر شش ضلعی با کد $\theta_1\theta_2\cdots\theta_{i-1}\beta\theta_{i+1}\cdots\theta_{n-1}$ باشد، آنگاه با

استفاده از لم (۳-۴) داریم:

$$\begin{aligned} \varphi(B_n) - \varphi(B'_n) = & -[\varphi(A) - x\varphi(A-u) + \varphi(A-u-v)] \\ & \times [\varphi(B) - x\varphi(B-r) + \varphi(B-r-s)]. \end{aligned}$$

که A زنجیر شش ضلعی با کد $\theta_1\theta_2\cdots\theta_{i-1}$ و B زنجیر شش ضلعی با کد $\theta_{i+1}\theta_{i+2}\cdots\theta_{n-1}$ است. توجه کنید که A دارای $4i+2$ رأس و B دارای $4(n-i-1)+2$ رأس بوده و $B_n(B'_n)$ ، $4n+2$ رأس دارد، با اعمال لم (۲-۴) و (۴-۳) برای A و B می توانیم علامت هر جمله سمت راست تساوی را تعیین کنیم، لذا داریم $B_n \geq B'_n$. از آنجا که A و B هر کدام حداقل یک شش ضلعی، از نوع جمله آخر لم (۴-۳) دارند، لذا نامساوی به دست می آید.

۲. $\theta_i = \gamma$ ، از آنجا که $i-1$ شش ضلعی اول G از نوع خطی اند، بنابراین با یک دوران حول

محور تقارن گذرنده از میان $i-1$ شش ضلعی اول آن زنجیر شش ضلعی $\bar{B}_n$ با

کد $\bar{\theta}_1 \bar{\theta}_2 \dots \bar{\theta}_{n-1}$ ساخته می شود. به وضوح دو زنجیر شش ضلعی $\bar{B}_n$ و B_n ایزومورف

هستند. لذا می توان این حالت را به حالت (۱) کاهش داد.

توجه داریم که کد B_n و B'_n فقط در مقدار β متمایزند. با تکرار این فرایند به یک سری از

زنجیرهای شش ضلعی با خاصیت $L_n > B''_n > B'_n > B_n$ می رسمیم، بنابراین ثابت

کرده ایم که L_n دارای کمترین مقدار انرژی در میان زنجیرهای شش ضلعی است.

قضیه از این شرط که $E(G)$ یک تابع یکنوا از ضرائب $\varphi(G)$ است، پیروی می کند [۱۶]. □

نتیجه ۴-۱: کران پایین انرژی π -الکترون کلی زنجیر شش ضلعی با n شش ضلعی عبارت است از:

$$2 + 2 \sum_{j=1}^n \sqrt{9 + 8 \cos \pi j / (n+1)} \quad (4-4)$$

تنها زنجیر شش ضلعی که این مقدار را می گیرد، L_n می باشد.

اثبات: مقادیر ویژه L_n مقادیر $\pm 1, \frac{1}{2} \left(\pm 1 \pm \sum_{j=1}^n \sqrt{9 + 8 \cos \pi j / (n+1)} \right)$ می باشند. همه حالت های

مثبت و منفی باید در نظر گرفته شوند [۱۶]. □

با استفاده از این نتیجه و قضیه قبل به راحتی نتیجه اصلی حاصل می شود.

نتیجه قبل کران پایین انرژی π -الکترون کلی زنجیر شش ضلعی با n شش ضلعی را بهبود می -

بخشد. مطالعات عددی نشان می دهد که این کران از روش ارائه شده در مرجع [۸] بهتر است [۱۶].

اما لازم به ذکر است که این کران فقط برای زنجیرهای شش ضلعی ثابت شده است. مسئله اصلی محاسبه انرژی π -الکترون کلی سیستم شش ضلعی CC می باشد، به نتیجه زیر توجه کنید:

نتیجه ۴-۲: فرض کنید B_n یک سیستم شش ضلعی CC با n شش ضلعی باشد، اگر $B_n \neq L_n$ آنگاه:

$$E(B_n) > E(L_n)$$

در عبارت فوق L_n یک سیستم شش ضلعی CC با کمترین انرژی می باشد. از این گذشته، مطالعات عددی تایید می کند که بیشترین انرژی مربوط به زنجیرهای شش ضلعی زیگ-زاگی است. با توجه به اثبات قضیه قبل به نظر می رسد اثبات این مطلب به طور مشابه عملی باشد، اما در قسمت بعدی خواهیم دید که برای اثبات از روش دیگری باید استفاده کرد [۱۶].

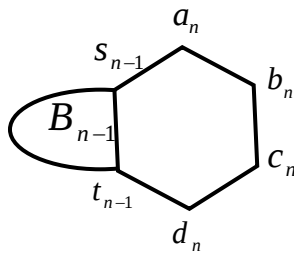
۴-۳. زنجیرهای شش ضلعی با بیشترین انرژی

در این قسمت زنجیرهای شش ضلعی با بیشترین انرژی را معرفی می کنیم [۱۸].

لم ۴-۴: فرض کنید B_{n-1} یک زنجیر شش ضلعی با $n-1$ شش ضلعی بوده و B_n از B_{n-1} با پیوستن یک شش ضلعی به آن به دست آید، اگر رئوس B_n مانند شکل (۴-۴) نامگذاری شده باشند، آنگاه داریم:

1. $\varphi(B_n - a_n) = (x^3 - 2x)\varphi(B_{n-1}) + (1 - x^2)\varphi(B_{n-1} - t_{n-1})$;
2. $\varphi(B_n - d_n) = (x^3 - 2x)\varphi(B_{n-1}) + (1 - x^2)\varphi(B_{n-1} - s_{n-1})$;
3. $\varphi(B_n - b_n) = (x^3 - x)\varphi(B_{n-1}) - x^2(\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}))$
 $+ \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + x\varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})$;
4. $\varphi(B_n - c_n) = (x^3 - x)\varphi(B_{n-1}) - x^2(\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}))$
 $+ \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) + x\varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})$;
5. $\varphi(B_n - a_n - b_n) = (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1}) - x\varphi(B_{n-1} - t_{n-1})$;
6. $\varphi(B_n - b_n - c_n) = x^2\varphi(B_{n-1}) - x(\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}))$
 $+ \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})$;
7. $\varphi(B_n - c_n - d_n) = (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1}) - x\varphi(B_{n-1} - s_{n-1})$;
8. $\varphi(B_n) = (x^4 - 3x^2 + 1)\varphi(B_{n-1}) + (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})$
 $+ (2x - x^3)(\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}))$
 $- 2\sum_{C_i \in C_{a_nb_n}} (B_n - C_i)$;

که در آن $B_n - a_n$ گراف B_n حاصل از حذف رأس a_n و مجموعه دورهای B_n شامل یال a_nb_n می باشد [۱۸].



شکل (۴-۴)

اثبات: فقط قسمت (۸و۱) را ثابت می کنیم و از اثبات بقیه قسمت ها صرف نظر می کنیم. با

استفاده از لم (۳-۱) برای گراف $\varphi(B_n - a_n)$ داریم:

$$\begin{aligned}
\varphi(B_n - a_n) &= x\varphi(B_n - a_n - d_n) - \varphi(B_n - a_n - d_n - c_n) - \varphi(B_n - a_n - d_n - t_{n-1}) \\
&= x(x^2 - 1)\varphi(B_{n-1}) - x\varphi(B_{n-1}) - (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) \\
&= (x^3 - 2x)\varphi(B_{n-1}) + (1 - x^2)\varphi(B_{n-1} - t_{n-1});
\end{aligned}$$

و برای اثبات قسمت (۸) داریم:

$$\begin{aligned}
\varphi(B_n) &= \varphi(B_n - a_n b_n) - \varphi(B_n - a_n - b_n) - 2 \sum_{C_j \in C_{a_n b_n}} (B_n - C_j) \\
&= x\varphi(B_n - b_n) - \varphi(B_n - b_n - c_n) - \varphi(B_n - a_n - b_n) - 2 \sum_{C_j \in C_{a_n b_n}} (B_n - C_j)
\end{aligned}$$

با استفاده از قسمت های (۳ و ۵ و ۶) تساوی (۸) به دست خواهد آمد. $\square$

لم ۴-۵: اگر B_n یک زنجیر شش ضلعی با n شش ضلعی مطابق شکل (۴-۴) باشد، آنگاه داریم [۱۸]:

1. $B_n - b_n \prec B_n - d_n$, $B_n - c_n \prec B_n - a_n$
2. $B_n - b_n - c_n \prec B_n - a_n - b_n$, $B_n - b_n - c_n \prec B_n - c_n - d_n$
3. $\varphi(B_n - b_n) + \varphi(B_n - c_n) \prec \varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n)$
, $\varphi(B_n - b_n) + \varphi(B_n - c_n) \prec \varphi(B_n - c_n) + \varphi(B_n - d_n)$

اثبات:

(۱) با استفاده از قسمت (۳ و ۲) لم (۴-۴) داریم:

$$\varphi(B_n - d_n) - \varphi(B_n - b_n) = -x(\varphi(B_{n-1}) - x\varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1}))$$

و با استفاده از لم (۴-۳) عبارت از مرتبه $4n-1$ سمت راست تساوی، صفر و عبارت از مرتبه

$4n-3$ ، مثبت و عبارت بعدی غیرمثبت است. از لم (۴-۱) داریم: $B_n - b_n \prec B_n - d_n$.

نامساوی بعدی به روش مشابه به دست خواهد آمد.

(۲) با استفاده از قسمت (۵ و ۶) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned} \varphi(B_n - a_n - b_n) - \varphi(B_n - b_n - c_n) = \\ -(\varphi(B_{n-1}) - x \varphi(B_{n-1} - s_{n-1})) + \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1}) \end{aligned}$$

و مجدداً با استفاده از لم (۳-۴) عبارت از مرتبه $4n - 2$ سمت راست تساوی، صفر و عبارت از

مرتبه $4n - 4$ ، مثبت و عبارت بعدی غیرمثبت است. از لم (۴-۱) داریم:

$$B_n - a_n - b_n \succ B_n - b_n - c_n$$

نامساوی بعدی به روش مشابه به دست خواهد آمد.

(۳) با استفاده از (۱)، داریم: $B_n - a_n \succ B_n - c_n$. با مقایسه ضرائب چندجمله ای مشخصه مربوط به

آنها داریم: $b(B_n - a_n, k) \geq b(B_n - c_n, k)$ و حداقل یک نامساوی ثابت می شود. از آنجا که:

$$\varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n) - (\varphi(B_n - b_n) + \varphi(B_n - c_n)) = \varphi(B_n - a_n) - \varphi(B_n - c_n)$$

با اعمال لم (۴-۱) اولین نامساوی ثابت می شود. نامساوی بعدی به روش مشابه قابل اثبات است.

لم ۴-۶: فرض کنید B_n زنجیر شش ضلعی با n شش ضلعی مطابق شکل (۴-۴) باشد.

اگر $B_{n-1} - s_{n-1} \prec B_{n-1} - t_{n-1}$ ، آنگاه:

1. $B_n - b_n \prec B_n - c_n \prec B_n - a_n$
 $, \quad B_n - b_n \prec B_n - d_n \prec B_n - a_n$
2. $B_n - b_n - c_n \prec B_n - c_n - d_n \prec B_n - a_n - b_n$
3. $\varphi(B_n - b_n) + \varphi(B_n - c_n) \prec \varphi(B_n - c_n)$
 $+ \varphi(B_n - d_n) \prec \varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n)$

اثبات: از لم (۴-۴) داریم:

$$\varphi(B_n - a_n) - \varphi(B_n - d_n) = (1 - x^2)(\varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}))$$

$$\begin{aligned}
\varphi(B_n - c_n) - \varphi(B_n - b_n) &= \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) \\
\varphi(B_n - a_n - b_n) - \varphi(B_n - c_n - d_n) &= -x \left(\varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) \right) \\
\varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n) - \varphi(B_n - c_n) - \varphi(B_n - d_n) &= \\
&= -x^2 \left(\varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) \right).
\end{aligned}$$

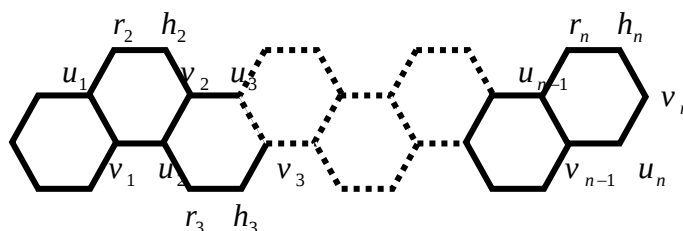
سمت راست تساوی اول را در نظر بگیرید. با استفاده از لم (۳-۴) عبارت از مرتبه $4n-1$ ، صفر و عبارت از مرتبه $4n-3$ ، غیرمنفی و عبارت از مرتبه $4n-5$ ، غیرمثبت و حداقل یک جمله مثبت یا منفی است. از لم (۴-۱) داریم: $B_n - c_n < B_n - a_n$. به روش مشابه، از تساوی دوم داریم: $B_n - b_n < B_n - c_n$ و از دو تساوی آخر به ترتیب خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
B_n - a_n - b_n &\succ B_n - c_n - d_n \\
\varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n) &\succ \varphi(B_n - c_n) + \varphi(B_n - d_n)
\end{aligned}$$

با ترکیب این نتایج لم ثابت خواهد شد [۱۸]. □

۴-۳-۱. ارائه روابط ترتیبی:

لم ۴-۷: اگر Z_n زنجیر زیگ-زاگی با n شش ضلعی به صورت زیر باشد، آنگاه داریم:



شکل (۴-۵)

1. $Z_n - v_n \prec Z_n - h_n \prec Z_n - u_n$
 $, \quad Z_n - v_n \prec Z_n - r_n \prec Z_n - u_n$
2. $Z_n - v_n - h_n \prec Z_n - h_n - r_n \prec Z_n - u_n - v_n$
3. $\varphi(Z_n - v_n) + \varphi(Z_n - h_n) \prec \varphi(Z_n - h_n)$
 $+ \varphi(Z_n - r_n) \prec \varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n)$

اثبات: به وضوح $Z_1 - u_1 = Z_1 - v_1$. باید ثابت کنیم: $Z_i - u_i > Z_i - v_i$ $\forall i > 1$. با استفاده از

قسمت (۱ و ۳) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned}
 & \varphi(Z_n - u_n) - \varphi(Z_n - v_n) \\
 &= (x^3 - 2x) \varphi(Z_{n-1}) + (1 - x^2) \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) \\
 &+ x^2 (\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) + \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1})) - (x^3 - x) \varphi(Z_{n-1}) \\
 &- \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1}) - x \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1}) \\
 &= -x (\varphi(Z_{n-1}) - x \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1})) + \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1}) \\
 &+ \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1})
 \end{aligned}$$

و با استفاده از لم (۳-۴)، عبارت از مرتبه $4n-1$ سمت راست تساوی، صفر و عبارت از مرتبه $4n-3$ ،

مثبت و عبارت از مرتبه $4n-5$ ، غیرمثبت است. از لم (۴-۱) داریم: $Z_i - u_i > Z_i - v_i$ $\forall i > 1$.

بنابراین شرط لم (۴-۶) برای Z_n و v_n و u_n برقرار است، لذا لم (مشابه لم (۴-۶)) قابل اثبات

است [۱۸]. □

فرض کنید W_n گرافی شامل حداقل $n+6$ رأس باشد که رئوس $u_1, u_2, \dots, u_n$ از مرتبه ۲ و

رئوس u_0, u_{n+1} از مرتبه بزرگتر از ۲ باشند، و برای هر $i = 0, 1, \dots, n$ ، u_i, u_{i+1} مجاور باشند.

اگر H و G دو گراف با مجموعه رئوس مجزا باشند، چنان که: $w \in V(H)$ و $u \in V(G)$ ، آنگاه

$G(u, w)H$ گراف به دست آمده از تلفیق^۱ رئوس w و u می باشد.

اگر G یک گراف شامل رئوس v و u باشد، آنگاه $G[u, v][p_p, p_q]$ گراف حاصل از تلفیق رئوس u و v که به ترتیب رئوس انتهایی دو مسیر p_p و p_q هستند، می باشد. به وضوح در حالت خاص $G[u, v][p_0, p_q] = G[v, r]p_{q+1}$ است، که r یک انتهای p_{q+1} می باشد. به دو لم زیر توجه کنید [۱۸].

لم ۴-۸: فرض کنید G یک گراف دوبخشی و v و u دو رأس مجاور از آن باشند، اگر $G-u$ و $G-v$ ایزومورف باشند و هیچ کدام از آنها به دوری به طول $4s$ وابسته نباشند، آنگاه داریم:

$$G[u, v][p_0, p_n] \succ G[u, v][p_p, p_q] \quad (۵-۴)$$

که $p > 0, p + q = m$ و p_p و p_q دو مسیر با p و q رأس می باشند.

لم ۴-۹: فرض کنید W_n گرافی دوبخشی، u_0 و u_{n+1} دو رأس مجاور و $u_0 u_1 u_2 \dots u_{n+1}$ دور القایی از آن باشد، اگر $W_n - u_0 - u_1 - \dots - u_n$ و $W_n - u_1 - u_2 - \dots - u_{n+1}$ ایزومورف باشند و u_0 و u_{n+1} به هیچ دوری به طول $4s$ وابسته نباشند، آنگاه برای $1 < i < n + 1$ داریم:

$$W_n(u_1, v)G \succ W_n(u_i, v)G \quad (۶-۴)$$

که G گرافی دوبخشی و v رأسی از آن است [۱۸]. حال به اثبات نتیجه اصلی می پردازیم.

قضیه ۴-۲: برای هر زنجیر شش ضلعی $B_n \neq Z_n$ با n شش ضلعی داریم:

^۱ identifying

1. $B_n - s_n \prec Z_n - u_n \quad s_n \in \{a_n, b_n, c_n, d_n\}$
2. $B_n - s_n - t_n \prec Z_n - u_n - v_n \quad s_n t_n \in \{a_n b_n, b_n c_n, c_n d_n\}$
3. $\varphi(B_n - s) + \varphi(B_n - t) \prec \varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n) \quad st \in \{a_n b_n, b_n c_n, c_n d_n\}$
4. $B_n \prec Z_n$.

اثبات : با استقرا روی تعداد شش ضلعی ها داریم:

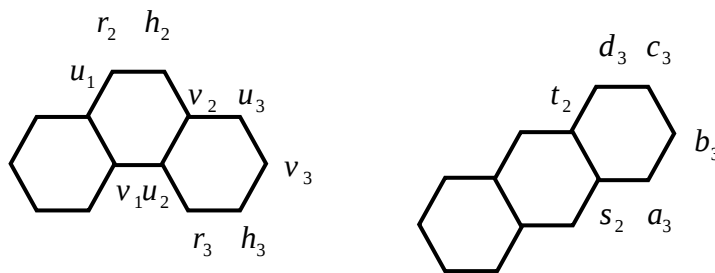
(I). برای $n=3$ ، اگر $B_3 \neq Z_3$ آنگاه $B_3 = L_3$ و $B_3 - a_3, B_3 - d_3$ ایزومورفند.

۱. اگر $W_n = Z_2$ و G یک مسیر با چهار رأس $\bar{u}_i \in \{u_2, v_2, h_2, r_2\}$ و v رأس انتهایی آن

باشد، با استفاده از رابطه (۴-۶) داریم:

$$Z_3 - u_3 = Z_2(u_2, v)G \succ Z_2(u_i, v)G = L_3 - a_3 = L_3 - b_3.$$

آنگاه از قسمت (۱) لم (۴-۵) قسمت (۱) قضیه ثابت است [۱۷].



شکل (۴-۶)

۲. به وضوح اگر $W_n = Z_2$ و G یک مسیر با چهار رأس $\bar{u}_i \in \{u_2, v_2, h_2, r_2\}$ و v رأس

انتهایی آن باشد، با استفاده از رابطه (۴-۶) داریم:

$$Z_3 - u_3 - v_3 = Z_2(u_2, v)G \succ Z_2(u_i, v)G = L_3 - a_3 - b_3 = L_3 - c_3 - d_3.$$

آنگاه از قسمت (۲) لم (۴-۵) قسمت (۲) قضیه ثابت است.

۳. از قسمت (۱) داریم $Z_3 - u_3 \succ L_3 - a_3$. بنابراین کفایت ثابت کنیم، $Z_3 - v_3 \succ L_3 - b_3$.

اگر $uv = t_2 d_3$ و $uv = u_2 r_3$ بترتیب در $L_3 - b_3$ و $Z_3 - v_3$ باشند، با اعمال روابط موجود

برای چندجمله ای مشخصه داریم:

$$\begin{aligned}\varphi(Z_3 - v_3) &= \varphi(Z_3 - v_3 - u_2 r_3) - \varphi(Z_3 - v_3 - u_2 - r_3), \\ \varphi(L_3 - b_3) &= \varphi(Z_3 - b_3 - t_2 d_3) - \varphi(Z_3 - b_3 - t_2 - d_3)\end{aligned}$$

توجه کنید که:

$$\varphi(Z_3 - v_3 - u_2 r_3) = \varphi(Z_3 - b_3 - t_2 d_3)$$

از روابط قبل داریم:

$$\begin{aligned}\varphi(Z_3 - v_3 - u_2 - r_3) &= x \varphi(C_6[u, v][p_0, p_4]), \\ \varphi(Z_3 - b_3 - t_2 - d_3) &= x \varphi(C_6[u, v][p_1, p_3]).\end{aligned}$$

بنابراین:

$$\begin{aligned}\varphi(Z_3 - v_3) - \varphi(L_3 - b_3) &= \\ &= -x \varphi(C_6[u, v][p_0, p_4]) + x \varphi(C_6[u, v][p_1, p_3])\end{aligned}$$

که C_6 دوری با رأس ۶ و u و v دو رأس مجاور در آن هستند و p_i مسیری با i رأس را

نشان می دهد. از رابطه (۴-۵) داریم:

$$x \varphi(C_6[u, v][p_0, p_4]) \succ x \varphi(C_6[u, v][p_1, p_3])$$

از آنجا که $x \varphi(C_6[u, v][p_1, p_3])$ ، $x \varphi(C_6[u, v][p_0, p_4])$ هر دو دارای ۱۰ رأس می-

باشند، با استفاده از لم (۴-۱) داریم:

$$Z_3 - v_3 \succ L_3 - b_3$$

بنابراین:

$$\begin{aligned} \varphi(Z_3 - u_3) + \varphi(Z_3 - v_3) &\succ \\ \varphi(L_3 - a_3) + \varphi(L_3 - b_3) &= \varphi(L_3 - c_3) + \varphi(L_3 - d_3) \end{aligned}$$

آنگاه از قسمت (۳) لم (۴-۵) قسمت (۳) قضیه ثابت است.

۴. از قسمت (۸) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned} \varphi(Z_3) &= (x^4 - 3x + 1)\varphi(Z_2) + (2x - x^3)(\varphi(Z_2 - u_2) + \varphi(Z_2 - v_2)) \\ &\quad + (x^2 - 1)\varphi(Z_2 - u_2 - v_2) - 2\varphi(C_6[u_1, v_1][p_2, p_0]) - 2\varphi(p_4) - 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi(L_3) &= (x^4 - 3x + 1)\varphi(L_2) + (2x - x^3)(\varphi(L_2 - s_2) + \varphi(L_2 - t_2)) \\ &\quad + (x^2 - 1)\varphi(L_2 - s_2 - t_2) - 2\varphi(C_6[u_1, v_1][p_1, p_1]) - 2\varphi(p_4) - 2 \end{aligned}$$

از آنجا که $L_2 = Z_2$ ، و $L_2 - s_2$ و $L_2 - v_2$ ایزومورفند، داریم:

$$\begin{aligned} \varphi(Z_3) - \varphi(L_3) &= (2x - x^3)(\varphi(Z_2 - u_2) - \varphi(L_2 - t_2)) \\ &\quad - 2(\varphi(C_6[u_1, v_1][p_2, p_0]) - \varphi(C_6[u_1, v_1][p_1, p_1])). \end{aligned}$$

از رابطه (۴-۵)، $L_2 - t_2 \prec Z_2 - u_2$ و

$$\varphi(C_6[u_1, v_1][p_1, p_1]) \prec \varphi(C_6[u_1, v_1][p_2, p_0])$$

با مقایسه سمت راست تساوی و با استفاده از لم (۴-۱) خواهیم داشت:

$$L_3 \prec Z_3$$

(II). فرض کنیم حکم برای زنجیرهایی با کمتر از n شش ضلعی درست باشد. اگر B_n یک زنجیر شش ضلعی با $n \geq 4$ شش ضلعی و Z_n یک زنجیر زیگ-زاگی باشد، خواهیم داشت: (شکل (۴-۵) و (۴-۶))

۱. از قسمت (۱ و ۲) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned}\varphi(Z_n - u_n) - \varphi(B_n - a_n) &= (x^3 - 2x)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) \\ &\quad + (1 - x^2)(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1})), \\ \varphi(Z_n - u_n) - \varphi(B_n - d_n) &= (x^3 - 2x)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) \\ &\quad + (1 - x^2)(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1})).\end{aligned}$$

از فرض استقرا داریم:

$$Z_{n-1} \succ B_{n-1}, Z_{n-1} - u_{n-1} \succ B_{n-1} - s_{n-1}, Z_{n-1} - u_{n-1} \succ B_{n-1} - t_{n-1}.$$

با مقایسه سمت راست تساوی و لم (۴-۱) داریم:

$$Z_n - u_n \succ B_n - a_n, Z_n - u_n \succ B_n - d_n.$$

بنابراین از لم (۴-۵) قسمت (۱) ثابت است.

۲. از قسمت (۵ و ۷) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned}\varphi(Z_n - u_n - v_n) - \varphi(B_n - a_n - b_n) &= (x^2 - 1)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) \\ &\quad - x(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1})), \\ \varphi(Z_n - u_n - v_n) - \varphi(B_n - c_n - d_n) &= (x^2 - 1)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) \\ &\quad - x(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1})).\end{aligned}$$

از فرض استقرا داریم:

$$Z_{n-1} \succ B_{n-1}, Z_{n-1} - u_{n-1} \succ B_{n-1} - s_{n-1}, Z_{n-1} - u_{n-1} \succ B_{n-1} - t_{n-1}$$

با مقایسه طرف راست تساوی و لم (۴-۱) خواهیم داشت:

$$Z_n - u_n - v_n \succ B_n - a_n - b_n,$$

$$Z_n - u_n - v_n \succ B_n - c_n - d_n.$$

بنابراین با استفاده از لم (۴-۵) قسمت (۲) ثابت می شود.

۳. از قسمت (۱ و ۳) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned} & \varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n) - (\varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n)) = \\ & (2x^3 - 3x)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) + (1 - x^2)(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1})) \\ & - x^2 [\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) + \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1})] \\ & + \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + x(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})), \\ & \varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n) - (\varphi(B_n - c_n) + \varphi(B_n - d_n)) = \\ & (2x^3 - 3x)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) + (1 - x^2)(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1})) \\ & - x^2 [\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) + \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1})] \\ & + \varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}) + x(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})), \end{aligned}$$

از فرض استقرا، با مقایسه طرف راست تساوی و لم (۴-۱) خواهیم داشت:

$$\varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n) \succ \varphi(B_n - a_n) + \varphi(B_n - b_n),$$

$$\varphi(Z_n - u_n) + \varphi(Z_n - v_n) \succ \varphi(B_n - c_n) + \varphi(B_n - d_n).$$

بنابراین با استفاده از لم (۴-۵) قسمت (۳) ثابت می شود.

۴. از قسمت (۸) لم (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned}
\varphi(Z_n) - \varphi(B_n) &= (x^4 - 3x + 1)(\varphi(Z_{n-1}) - \varphi(B_{n-1})) \\
&+ (2x - x^3)[(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) + \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1})) - (\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}))] \\
&+ (x^2 - 1)(\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1})) \\
&- 2 \sum_{C_i \in C_{u_n v_n}(Z_n)} \varphi(Z_n - C_i) + 2 \sum_{C'_i \in C_{a_n b_n}(B_n)} \varphi(B_n - C'_i),
\end{aligned}$$

که $C_{u_n v_n}(Z_n)$ و $C_{a_n b_n}(B_n)$ به ترتیب مجموعه دورهای B_n شامل یال $a_n b_n$ و مجموعه دورهای Z_n شامل یال $u_n v_n$ است. به علاوه دور موجود در $(C_{a_n b_n}(B_n))(C_{u_n v_n}(Z_n))$ که شامل i شش-ضلعی است را با $C_i(C'_i)$ نشان می دهیم. به راحتی قابل اثبات است که $Z_{n-i} - u_{n-i} - v_{n-i}$ و $Z_n - C_i$ ایزومورف بوده و همین طور $B_n - C'_i$ با یکی از اعضای زیر ایزومورفند.

$$B_{n-i} - s_{n-i} - t_{n-i}, s_{n-i} t_{n-i} \in \{a_{n-i} b_{n-i}, b_{n-i} c_{n-i}, c_{n-i} d_{n-i}\}$$

از فرض استقرا داریم:

$$Z_n - C_i \succ B_n - C'_i, i = 1, 2, \dots, n-2.$$

به وضوح داریم:

$$\begin{aligned}
\varphi(Z_n - C_n) &= \varphi(B_n - C'_n) = 1, \\
\varphi(Z_n - C_{n-1}) &= \varphi(B_n - C'_{n-1}) = \varphi(P_3)
\end{aligned}$$

که P_3 مسیری با سه رأس است.

مجدداً از فرض استقرا داریم:

$$\begin{aligned}
Z_{n-1} \succ B_{n-1}, Z_{n-1} - u_{n-1} - v_{n-1} \succ B_{n-1} - s_{n-1} - t_{n-1} \\
\varphi(Z_{n-1} - u_{n-1}) - \varphi(Z_{n-1} - v_{n-1}) \succ \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - t_{n-1}).
\end{aligned}$$

با مقایسه عبارت $\varphi(Z_n) - \varphi(B_n)$ و لم (۴-۱) به $Z_n \succ B_n$ می‌رسیم [۱۸]. □

توجه کنید که در این قسمت زنجیر شش ضلعی با بیشترین انرژی معرفی شد، تعیین سیستم شش-ضلعی cc با بیشترین انرژی کار مشکلی است [۱۸].

۴-۴. زنجیرهای کاملاً گوشه‌ای با کمترین انرژی

یک زنجیر شش ضلعی کاملاً گوشه‌ای است اگر اتصال همه شش ضلعی‌ها از نوع α یا γ باشد. مجموعه همه زنجیرهای شش ضلعی کاملاً گوشه‌ای با n شش ضلعی را با $\mathcal{W}_n$ نشان می‌دهیم. در دو بخش قبل دیدیم که بیشترین انرژی مربوط به زنجیرهای شش ضلعی کاملاً گوشه‌ای زیگ-زاگی و کمترین انرژی مربوط به زنجیر شش ضلعی خطی می‌باشد. در این بخش ثابت می‌شود که کمترین مقدار انرژی در میان زنجیرهای شش ضلعی کاملاً گوشه‌ای مربوط به زنجیرهای شش ضلعی حلقوی است [۴].

لم ۴-۱۰: اگر u و v رئوس مجاور در گراف G باشند، آنگاه:

$$\begin{aligned} \varphi(G) = & \varphi(G - uv) - \varphi(G - u - v) \\ & - 2\sqrt{\varphi(G - u)\varphi(G - v) - \varphi(G - uv)\varphi(G - u - v)} \end{aligned} \quad (۷-۴)$$

که ریشه دوم تفسیر شده، به عنوان چندجمله‌ای با یک ضریب مثبت در جمله بزرگتر است [۴].

لم ۴-۱۱: اگر u و v رئوس مجاور در گراف G باشند، آنگاه:

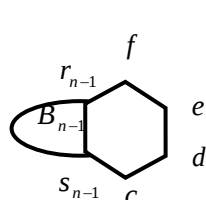
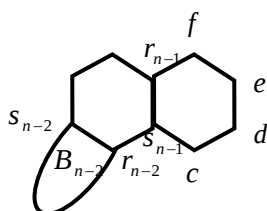
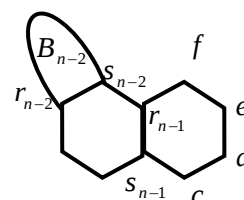
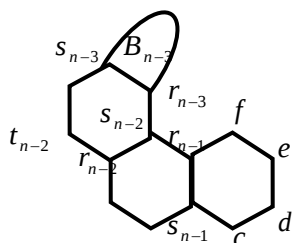
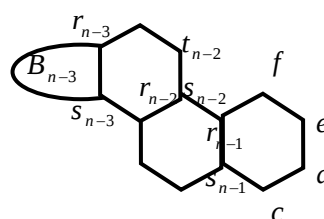
$$(\varphi(G) - \varphi(G - uv) - \varphi(G - u - v))^2 = 4(\varphi(G - u)\varphi(G - v) - \varphi(G)\varphi(G - u - v))$$

لم ۴-۱۲: اگر $B_n = \psi_n$ ، $(n \geq 2)$ از $B_{n-1} \in \psi_{n-1}$ با پیوستن یک شش ضلعی به آن به دست آمده باشد، آنگاه [۴]:

- (i) $\varphi(B_n - e - d) < \varphi(B_n - c - d)$
 $\varphi(B_n - e - d) < \varphi(B_n - e - f)$
(ii) $\varphi(B_n - e) < \varphi(B_n - f)$
(iii) $\varphi(B_n - d) < \varphi(B_n - c)$.

اثبات: قسمت (i) با استفاده از لم (۴-۵) برقرار است. برای اثبات قسمت های بعدی؛ فرض کنید $B_n = C_1 C_2 \dots C_n$ و $B_{n-k} = C_{1+k} C_{2+k} \dots C_n$ یک زیر زنجیر از آن باشد.

اگر C_k با پیوستن از نوع γ به B_{n-k} بپیوندد زنجیر حاصل را با $B_n^{k\gamma}$ نشان می دهیم، و اگر C_k با پیوستن از نوع α به B_{n-k} بپیوندد زنجیر حاصل را با $B_n^{k\alpha}$ نشان می دهیم (شکل (۴-۷)، b و c). توجه داریم که (ii)، (iii)، (ii) معادلند، لذا کافیت (ii) را با استقرا روی n ثابت کنیم.

(a) B_n (b) $B_n^{(n-2)\gamma}$ (c) $B_n^{(n-2)\alpha}$ (d) $B_n^{(n-3)\alpha}$ (e) $B_n^{(n-3)\gamma}$

شکل (۴-۷). نمایش مدلهای $B_n^{(n-k)\theta}$

اگر $n = 2, 3$ به سادگی خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\varphi(B_2 - f) &= x^9 - 9x^7 + 26x^5 - 29x^3 + 11x, \\ \varphi(B_2 - e) &= x^9 - 9x^7 + 25x^5 - 26x^3 + 8x, \\ \varphi(B_3^{1_\alpha} - f) &= x^{13} - 14x^{11} + 73x^9 - 181x^7 + 224x^5 - 129x^3 + 26x, \\ \varphi(B_3^{1_\alpha} - e) &= x^{13} - 14x^{11} + 72x^9 - 174x^7 + 208x^5 - 116x^3 + 24x, \\ \varphi(B_3^{1_\gamma} - f) &= x^{13} - 14x^{11} + 73x^9 - 182x^7 + 228x^5 - 135x^3 + 29x, \\ \varphi(B_3^{1_\alpha} - e) &= x^{13} - 14x^{11} + 72x^9 - 174x^7 + 207x^5 - 113x^3 + 21x.\end{aligned}$$

لذا (ii) برقرار است.

برای $n \geq 4$ ، فرض کنیم (ii) برای $n-1$ درست باشد، از روابط موجود برای چندجمله ای مشخصه

$B_2 - e$ و $B_2 - f$ استفاده می کنیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\varphi(B_n - e) &= (x^3 - x)\varphi(B_{n-1}) - (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1} - r_{n-1}) \\ &\quad - x^2\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) + x\varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - r_{n-1}), \\ \varphi(B_n - f) &= (x^3 - 2x)\varphi(B_{n-1}) - (x^2 - 1)\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) \\ \Rightarrow \quad \varphi(B_n - f) - \varphi(B_n - e) &= [\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - r_{n-1})] \\ &\quad - x[\varphi(B_{n-1}) - x\varphi(B_{n-1} - r_{n-1}) + \varphi(B_{n-1} - s_{n-1} - r_{n-1})].\end{aligned}\tag{۸-۴}$$

دو حالت اتفاق می افتد (شکل (۷-۴) b و c).

حالت (b): از آنجا که در این حالت $\varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) > \varphi(B_{n-1} - r_{n-1})$ (با استفاده از فرض استقرا)،

با در نظر گرفتن جملات بزرگتر در دو جمله سمت راست تساوی فوق و با اعمال لم (۱-۴) و رابطه

(۸-۳) حکم (ii) ثابت است.

حالت (c): در این حالت با استفاده از فرض استقرا $\varphi(B_{n-1}-s_{n-1}) \prec \varphi(B_{n-1}-r_{n-1})$ ، لذا حکم ثابت است.

در ادامه باید دو حالت (d, e) نیز که گسترش یافته دو حالت قبل هستند، در نظر گرفته شوند. از تساوی (۸-۴) و با در نظر گرفتن روابط موجود برای چندجمله ای مشخصه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \varphi(B_n - f) - \varphi(B_n - e) &= x \varphi(B_{n-1} - s_{n-2} - r_{n-1}) \\ &+ 2x \sum_{C_j \in C_{r_{n-1}}} \varphi(B_{n-1} - C_j) + \varphi(B_{n-1} - s_{n-1}) - \varphi(B_{n-1} - r_{n-1}) \\ (1) \quad &= x \varphi(B_{n-2}) + (x^4 - 3x^2 + 1) \varphi(B_{n-2} - s_{n-2}) \\ &+ (-x^3 + 2x) \varphi(B_{n-2} - s_{n-2} - r_{n-2}) - \varphi(B_{n-2} - r_{n-2}) + 2x \sum_{C_j \in C_{r_{n-1}}} \varphi(B_{n-1} - C_j) \end{aligned}$$

و از لم (۱۰-۴) و (۱۱-۴) و (۱-۳) داریم:

$$2x \sum_{C_j \in C_{r_{n-1}}} \varphi(B_{n-1} - C_j) = \varphi(B_{n-2} - s_{n-2} r_{n-2}) + \varphi(B_{n-2} - s_{n-2} - r_{n-2}) - \varphi(B_{n-2}).$$

توجه کنید برای حالت (d) داریم:

$$\varphi(B_{n-2} - s_{n-2} r_{n-2}) = x \varphi(B_{n-2} - r_{n-2}) - \varphi(B_{n-2} - t_{n-2} - r_{n-2})$$

با اعمال رابطه (i) داریم:

$$\varphi(B_{n-2} - s_{n-2} - r_{n-2}) \succ \varphi(B_{n-2} - t_{n-2} - r_{n-2})$$

و برای حالت (e) داریم:

$$\varphi(B_{n-2} - s_{n-2} r_{n-2}) = x \varphi(B_{n-2} - s_{n-2}) - \varphi(B_{n-2} - t_{n-2} - s_{n-2})$$

و با اعمال رابطه (i) از قضیه، خواهیم داشت:

$$\varphi(B_{n-2} - s_{n-2} - r_{n-2}) \succ \varphi(B_{n-2} - t_{n-2} - s_{n-2})$$

با جابجایی $\varphi(B_{n-2} - s_{n-2} r_{n-2}), \varphi(B_{n-1} - C_j)$ با عبارات با مرتبه بزرگتر سمت راست

تساوی (1) داریم:

$$\begin{aligned} & \varphi(B_n - f) - \varphi(B_n - e) \\ (2) \quad & = f_{4n-3}^{(1)}(x) + (x^2 - 1) \\ & \times \left[(x^2 - 1)(\varphi(B_{n-2} - s_{n-2}) - \varphi(B_{n-2} - r_{n-2})) - x \varphi(B_{n-2} - s_{n-2} - r_{n-2}) \right] \end{aligned}$$

که $f_{4n-3}^{(1)}(x)$ به فرم $(*)$ از درجه $4n-3$ است.

((اگر G گرافی دوبخشی باشد، آنگاه $\varphi(G)$ از رابطه زیر بدست می آید:

$$\varphi(G) = \sum_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k b(G, k) x^{n-2k} \quad (*)$$

برای حالت (d) با استفاده از فرض استقرا رابطه $\varphi(B_{n-2} - s_{n-2}) \succ \varphi(B_{n-2} - r_{n-2})$ برقرار است.

بنابراین با استفاده از رابطه (2) و لم (۴-۱)، قسمت (ii) را برقرار است.

برای حالت (e) با استفاده از فرض استقرا رابطه $\varphi(B_{n-2} - s_{n-2}) \prec \varphi(B_{n-2} - r_{n-2})$ برقرار است.

بنابراین باید حالات $B_n^{(n-4)\gamma}$ و $B_n^{(n-4)\alpha}$ در نظر گرفته شود.

با ساده کردن رابطه (2) داریم:

$$\begin{aligned} & \varphi(B_n - f) - \varphi(B_n - e) \\ (3) \quad & = f_{4n-3}^{(2)}(x) - (x^2 - 1)^2 \\ & \times \left[(x^2 - 1)(\varphi(B_{n-3} - s_{n-3}) - \varphi(B_{n-3} - r_{n-3})) - x \varphi(B_{n-3} - s_{n-3} - r_{n-3}) \right] \end{aligned}$$

که $f_{4n-3}^{(2)}(x)$ به فرم (*) از درجه $4n-3$ است.

برای حالت $B_n^{(n-4)\gamma}$ حکم (ii) با استفاده از لم (۱-۴) و رابطه (۸-۳) به سادگی برقرار است، باید حالت $B_n^{(n-4)\alpha}$ را نیز مانند قبل گسترش داد، در این صورت با ساده کردن طرف راست تساوی (3) داریم:

$$\begin{aligned} & \varphi(B_n - f) - \varphi(B_n - e) \\ (4) \quad & = f_{4n-3}^{(m)}(x) + (-1)^{m-1} (x^2 - 1)^m \\ & \times \left[(x^2 - 1) \left(\varphi(B_{n-(m+1)} - s_{n-(m+1)}) - \varphi(B_{n-(m+1)} - r_{n-(m+1)}) \right) \right. \\ & \left. - x \varphi(B_{n-(m+1)} - s_{n-(m+1)} - r_{n-(m+1)}) \right] \end{aligned}$$

که $f_{4n-3}^{(2)}(x)$ به فرم (*) از درجه $4n-3$ و $m=3$ است.

این روش تجزیه ای تا $m=n-2$ ادامه خواهد داشت. در این حالت با استفاده از $\varphi(B_1 - s_1) = \varphi(B_1 - r_1)$ داریم: $\varphi(B_n - f) = \varphi(B_n - e) = f_{4n-3}^{(n-1)}(x)$ ، که $f_{4n-3}^{(n-1)}(x)$ به فرم (*) از درجه $4n-3$ است. از این رو با اعمال لم (۴-۴) حکم (ii) ثابت است [۴]. □

لم ۴-۱۳: فرض کنید A_1 و B_1 دو زنجیر شش ضلعی کاملاً گوشه ای به ترتیب با j و $n-j$ شش ضلعی بوده، A زنجیر شش ضلعی نتیجه شده به وسیله $j-1$ شش ضلعی از A_1 باشد. اگر G_θ که $\theta = \alpha(\gamma)$ ، از $B_1(A_1)$ با تلفیق رئوس e و f با u و v (p و q) به دست آمده باشد. آنگاه:

$$\sum_{C \in C_{uv}(G_\gamma)} \varphi(G_\gamma - C) = \sum_{C' \in C_{pq}(G_\alpha)} \varphi(G_\alpha - C') \quad (9-4)$$

اثبات: برای هر $C \in C_{uv}(G_\gamma)$ ، یک $C' \in C_{pq}(G_\alpha)$ و یک تابع دوسویی $\eta: C_{uv}(G_\gamma) \rightarrow C_{pq}(G_\alpha)$

موجود است، چنان که $\varphi(G_\gamma - C) = \varphi(G_\alpha - C')$ در حقیقت C دوری در $C_{uv}(G_\gamma)$ و C' بعنوان دوری از G_α ، که شامل شش ضلعی های موجود در A و B' بعنوان C است، می باشد. بنابراین حکم ثابت است [۴]. □

قضیه ۳-۴: برای هر $n \geq 1$ و هر $B_n \in \psi_n$ ، داریم:

$$E(H_n) \leq E(B_n) \quad (۱۰-۴)$$

تساوی برقرار است، هرگاه: $[۴ \ B_n = H_n]$.

اثبات: اگر $B_n \in \psi_n$ یک زنجیر شش ضلعی با کمترین انرژی باشد، آنگاه می توان آن را به صورت

$$B_n = \beta \theta_2 \theta_3 \cdots \theta_{n-1} \quad \text{نشان داد، به طوری که برای } 2 \leq j \leq n-1, \theta_j \in \{\alpha, \gamma\} \text{ باشد.}$$

فرض کنیم $\theta_2 = \alpha$ (به عبارت دیگر در نظر بگیرید: $B_n = \beta \bar{\theta}_2 \bar{\theta}_3 \cdots \bar{\theta}_{n-1}$) و $B_n \neq H_n$. از آنجا که

$\psi_1 = \{H_1\}$ و $\psi_2 = \{H_2\}$ و $\psi_3 = \{H_3\}$ بنابراین $n \geq 4$ را در نظر می گیریم. اگر θ_j اولین عنصر

از $\theta_2 \theta_3 \cdots \theta_{n-1}$ باشد چنان که $\theta_j = \gamma$ ، بنابراین $j \geq 3$ است و داریم: $B_n = \beta \alpha \alpha \cdots \alpha \gamma \theta_{j+1} \cdots \theta_{n-1}$.

قرار می دهیم: $G_\gamma = B_n = \beta \alpha \alpha \cdots \alpha \gamma \theta_{j+1} \cdots \theta_{n-1}$. همچنین اگر $C_1 C_2 \cdots C_n$ شش ضلعی از B_n

باشند، داریم: $G_\gamma = C_1 C_2 \cdots C_n$ ، که C_i و C_{i+1} برای $i = 1, 2, \dots, n$ ، مجاورند. (شکل (۴-۸))

فرض کنید $B_1 = C_{j+1} C_{j+2} \cdots C_n$ و $A = C_1 C_2 \cdots C_{j-1}$ (توجه کنید که $A = H_{j-1}$)

$$G_\alpha = \beta \alpha \cdots \alpha \alpha \theta_{j+1} \cdots \theta_{n-1} \text{ و}$$

همان طور که در فصل سوم گفته شد روابط زیر را برای چندجمله ای مشخصه گراف داریم:

$$\begin{aligned}
\varphi(G) &= \varphi(G_1) \cdot \varphi(G_2) \\
\varphi(G) &= x \varphi(G-u) - \sum_{w \in N(u)} \varphi(G-u-v) - 2 \sum_{C_j \in C_u} \varphi(G-C_j) \quad (11-4) \\
\varphi(G) &= \varphi(G-uv) - \varphi(G-u-v) - 2 \sum_{C \in C_{uv}} \varphi(G-C)
\end{aligned}$$

با اعمال روابط فوق برای یال uv از G_γ خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
\varphi(G_\gamma) &= (x^2 - 1) \left[\varphi(A) \varphi(B_1) - \varphi(A-v_{j-1}) \varphi(B_1-e) \right] \\
&\quad - x \left[\varphi(A) \varphi(B_1-f) - \varphi(A-v_{j-1}) \varphi(B_1-e-f) + \varphi(A-u_{j-1}) \varphi(B_1) \right. \\
&\quad \left. - \varphi(A-u_{j-1}-v_{j-1}) \varphi(B_1-e) \right] + \varphi(A-u_{j-1}) \varphi(B_1-f) \\
&\quad - \varphi(A-u_{j-1}-v_{j-1}) \varphi(B_1-e-f) - 2 \sum_{C \in C_{uv}} \varphi(G_\gamma, C).
\end{aligned}$$

به طور مشابه با اعمال روابط (11-4) برای یال pq از G_α داریم:

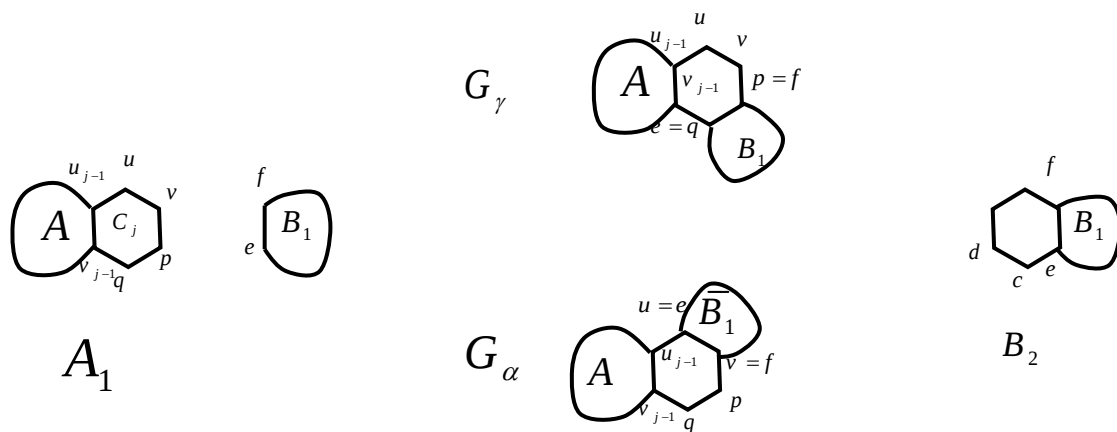
$$\begin{aligned}
\varphi(G_\alpha) &= (x^2 - 1) \left[\varphi(A) \varphi(B_1) - \varphi(A-u_{j-1}) \varphi(B_1-e) \right] \\
&\quad - x \left[\varphi(A) \varphi(B_1-f) - \varphi(A-u_{j-1}) \varphi(B_1-e-f) \right] \\
&\quad + \varphi(A-v_{j-1}) \varphi(B_1) - \varphi(A-u_{j-1}-v_{j-1}) \varphi(B_1-e) \\
&\quad + \left[\varphi(A-v_{j-1}) \varphi(B_1-f) - \varphi(A-u_{j-1}-v_{j-1}) \varphi(B_1-e-f) \right] \\
&\quad - 2 \sum_{C' \in C_{pq}} \varphi(G_\alpha, C').
\end{aligned}$$

از رابطه (9-4) داریم: $\sum_{C \in C_{uv}} \varphi(G_\gamma, C) = \sum_{C' \in C_{pq}} \varphi(G_\alpha, C')$ بنابراین:

$$\begin{aligned}
\varphi(G_\gamma) - \varphi(G_\alpha) &= \left(\varphi(A-u_{j-1}) - \varphi(A-v_{j-1}) \right) \\
&\quad \times \left[-x \left(\varphi(B_1) - x \varphi(B_1-e) + \varphi(B_1-e-f) \right) + \varphi(B_1-f) - \varphi(B_1-e) \right]
\end{aligned}$$

اگر B_2 از B_1 ، با پیوستن به یال ef به دست آید، خواهیم داشت:

$$\varphi(G_\gamma) - \varphi(G_\alpha) = (\varphi(A - u_{j-1}) - \varphi(A - v_{j-1}))(\varphi(B_2 - c) - \varphi(B_2 - d))$$



شکل (۸-۴)

بنا به لم (۱۲-۴)، روابط $\varphi(A - u_{j-1}) > \varphi(A - v_{j-1})$ و $\varphi(B_2 - c) > \varphi(B_2 - d)$ برقرارند و با در نظر گرفتن جملات از مرتبه بزرگتر در طرف راست تساوی فوق و با استفاده از لم (۱-۴) داریم:

$$\varphi(G_\gamma) > \varphi(G_\alpha).$$

که این با مینیمم بودن G_γ در تناقض است لذا حکم ثابت است [۴].

نتیجه ۳-۴: با استفاده از دو قضیه (۲-۴) و (۱-۴)، اگر B_n یک زنجیر شش ضلعی باشد، می توان نوشت:

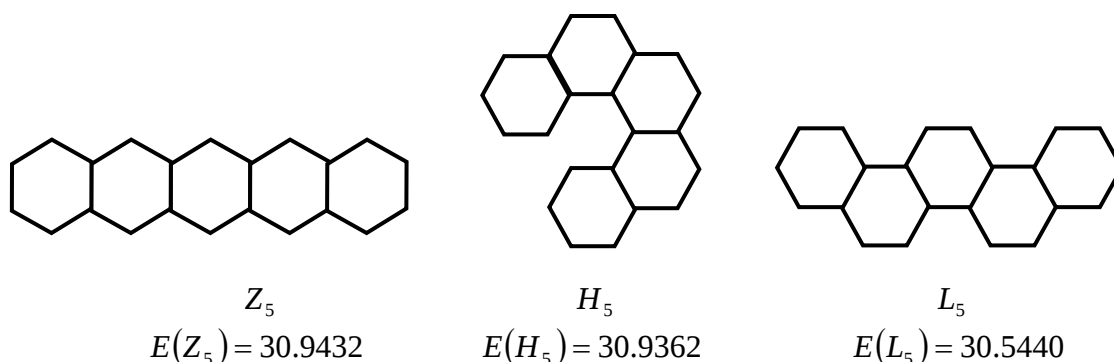
$$E(L_n) \leq E(B_n) \leq E(Z_n) \quad (۱۲-۴)$$

در حالتی که زنجیرهای شش ضلعی، کاملاً گوشه ای باشند خواهیم داشت:

$$E(H_n) \leq E(B_n) \leq E(Z_n) \quad (۱۳-۴)$$

مثال ۱-۴: گراف های نشان داده شده در شکل (۹-۴) را در نظر بگیرید، با اعمال قضیه فوق و با مشاهده مقادیری که برای انرژی این سیستم ها به دست آمده، رابطه ترتیبی زیر به دست خواهد آمد.

$$E(L_5) \leq E(H_5) \leq E(Z_5)$$



شکل (۹-۴)

۴-۵. تعمیمی برای زنجیرهای شش ضلعی دوگانه

در این بخش قصد داریم دسته ای از سیستم های شش ضلعی $p.c$ موسوم به زنجیرهای شش ضلعی دوگانه^۱ را معرفی کرده و تعمیمی از قضیه (۴-۱) را برای این زنجیرها بیان نماییم [۱۹].

همان طور که گفته شد یک زنجیر شش ضلعی یک سیستم شش ضلعی $c.c$ است که در آن هر شش ضلعی با بیشتر از دو شش ضلعی مجاور نیست. یک زنجیر شش ضلعی m -تایی^۲ شامل m زنجیر شش ضلعی فشرده است. اگر $m = 2$ باشد، زنجیر را زنجیر شش ضلعی دوگانه گوئیم. این زنجیر یک سیستم $p.c$ است.

$$b \equiv r, c \equiv s, d \equiv t, e \equiv u \quad (i)$$

$$b \equiv t, a \equiv s, d \equiv v, c \equiv u \quad (ii)$$

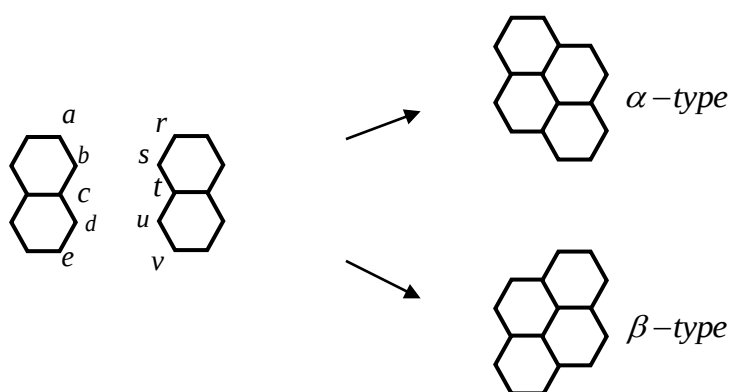
اگر نفتالن ها^۳ (دو شش ضلعی به هم پیوسته) را طوری میزان کنیم که یال های درونی^۴ بصورت افقی

^۱ double hexagonal chain ^۲ m -tuple

^۳ naphthalene ^۴ interior edge

قرار گیرند، تلفیق یال های سه گانه آن ها به دو صورت امکان پذیر است، به ترتیب آنها را تلفیق

α -type و β -type می نامیم [۱۹]. (شکل (۱۰-۴))



شکل (۱۰-۴). پیوستن نوع α, β در زنجیر دوگانه

شش ضلعی دوگانه $D_{2 \times n}$ از تلفیق نفتالن های جدید به نفتالن ابتدایی به دست می آید که اتصالات از

نوع $\theta = \{\alpha, \beta\}$ می باشد. (شکل (۱۰-۴)) بنابراین برای راحتی کار می نویسیم: $D_{2 \times n} = \theta_1 \theta_2 \dots \theta_{n-1}$

که، $\theta_j = \{\alpha, \beta\}$ برای هر j اگر $\theta_j = \theta_{j+1}$ زنجیر دوگانه را با $L_{2 \times n}$ و اگر $\theta_j \neq \theta_{j+1}$ زنجیر دوگانه را

با $Z_{2 \times n}$ نشان می دهیم. برای $n \geq 2$ ، $D_{2 \times n}$ یک سیستم شش ضلعی $p.c$ است.

قضیه ۴-۴: فرض کنید:

$$\phi_{2 \times n} = \{ D_{2 \times n} \mid n \text{ نفتالن است} \}$$

اگر $D_{2 \times n} \in \phi_{2 \times n}$ با n واحد نفتالن باشد، آنگاه:

$$L_{2 \times n} \preceq D_{2 \times n} \quad (۱۴-۴)$$

تساوی برقرار است، فقط اگر $L_{2 \times n} = D_{2 \times n}$ [۱۹].

نتیجه: در این فصل ابتدا نتایجی برای زنجیرهای شش ضلعی با کمترین و بیشترین مقدار انرژی و در

پایان تعمیمی از این روابط را برای زنجیرهای شش ضلعی دوگانه بیان نمودیم.

فصل پنجم

➤ بهینه سازی محاسبه انرژی

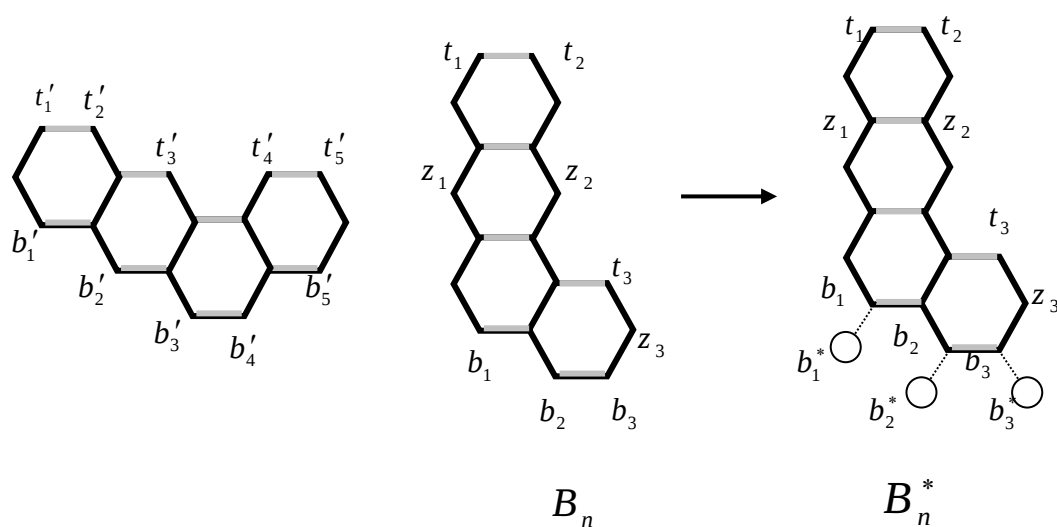
در این فصل قصد داریم با استفاده از مطالب گفته شده در فصل های گذشته روشی بهینه برای محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی ارائه دهیم، بدین منظور ابتدا الگوریتمی که برای محاسبه چندجمله ای مشخصه سیستم های بنزنی در دست است را بیان می کنیم [۸] و سپس در بخش بعدی یک رابطه ترتیبی برای دسته ای خاص از سیستم های CC موسوم به سیستم های شش ضلعی عنکبوتی و یک الگوریتم برای محاسبه انرژی این سیستم ها ارائه می دهیم و در قسمت پایانی روشی بهینه برای محاسبه انرژی سیستم های متقارن معرفی می کنیم. از آنجا که زنجیرهای شش ضلعی و زنجیرهای شش ضلعی دوگانه نیز دارای چنین تقارنی هستند، لذا این روش برای این سیستم ها کاربردی است.

۵-۱. الگوریتم محاسبه چندجمله ای مشخصه سیستم های بنزنی

فرض کنید B_n یک سیستم بنزنی با n رأس باشد، در این صورت می توان گراف مربوطه را روی صفحه طوری رسم کرد که برخی یال های آن به صورت عمودی قرار گیرند، این کار به شش طریق امکان پذیر است (که برخی حالات تکراری است). در هر حالت خطوط زیگ-زاگی موجود است که آنها را $z_1, z_2, \dots, z_p$ می نامیم، که p تعداد خطوط زیگ-زاگی سیستم و z_i ها بزرگترین مسیرهای یکنواخت در B_n هستند که نقاط بالایی t_i را به نقاط پایینی b_i می پیوندند.

برای هر i رأس مجازی b_i^* را توسط یک یال مجازی به b_i وصل می کنیم گراف حاصل را B_n^* می نامیم. (شکل (۵-۱))

برای هر رأس v از B_n^* رأس v^1 را تنها رأس مجاور بالایی، رأس v^0 را تنها رأس مجاور هم رده و رأس v^{-1} را تنها رأس مجاور پایینی قرار می دهیم [۸].



شکل (۵-۱)

ارائه الگوریتم:

برای هر رأس v از B_n^* بردار $w(v, h)$ را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$w(v, h) = (w_1(v, h), w_2(v, h), \dots, w_p(v, h))$$

۱. برای رئوس بالایی t_i قرار می دهیم:

$$w(t_k, \lambda) = (\delta_{1k}, \delta_{2k}, \dots, \delta_{3k}) \quad (۵-۱)$$

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 0 & i \neq k \\ 1 & i = k \end{cases} \quad \text{که در آن } k, i = 1, 2, \dots, p$$

۲. برای سایر رئوس v از B_n^* قرار می دهیم:

$$w(v, \lambda) = \lambda w(v^1, \lambda) - \sum_{r=0,1} w(v^{1r}, \lambda) \quad (۵-۲)$$

با انجام عملیات فوق دو ماتریس $n \times p$ و $n \times n$ به صورت زیر حاصل می شود:

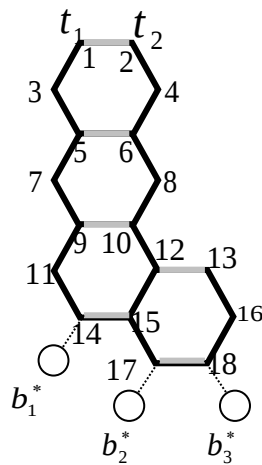
$$W(B_n, \lambda) = \left(w^T(v_1, \lambda), w^T(v_2, \lambda), \dots, w^T(v_n, \lambda) \right)^T = \left(w_k(v_i, \lambda) \right) \\ (i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, p)$$

$$W^*(B_n, \lambda) = \left(w^T(b_1^*, \lambda), w^T(b_2^*, \lambda), \dots, w^T(b_p^*, \lambda) \right)^T = \left(w_k(b_j^*, \lambda) \right) \\ (j, k = 1, 2, \dots, p)$$

در این صورت چندجمله ای مشخصه از معادله زیر حاصل می شود [۸]:

$$\varphi(B_n) = \varepsilon \cdot \det W^*(B_n, \lambda); \varepsilon = \{1, -1\} \quad (۳-۵)$$

مثال ۵-۱. الگوریتم فوق را برای شکل (۲-۵) به کار می گیریم [۸].



شکل (۲-۵)

اگر سیستم B_n^* مانند شکل (۲-۵) نامگذاری شود، با اعمال الگوریتم قبل مقادیر دو ماتریس

$W(B_n, \lambda)$ و $W^*(B_n, \lambda)$ به دست خواهد آمد.

ماتریس $W(B_n, \lambda)$

i	k		
	1	2	3
1	1	0	0
2	0	1	0
3	λ	-1	0
4	-1	λ	0
5	$\lambda^2 - 1$	$-\lambda$	0
6	$-\lambda$	$\lambda^2 - 1$	0
7	$\lambda^3 - \lambda$	$-2\lambda^2 + 2$	0
8	$-2\lambda^2 + 2$	$\lambda^3 - \lambda$	0
9	$\lambda^4 - 2\lambda^2 + 1$	$-2\lambda^3 + 3\lambda$	0
10	$-2\lambda^3 + 3\lambda$	$\lambda^4 - 2\lambda^2 + 1$	0
11	$\lambda^5 - \lambda^3 - \lambda$	$-3\lambda^4 + 7\lambda^2 - 3$	0
12	$-3\lambda^4 + 7\lambda^2 - 3$	$\lambda^5 - \lambda^3 - \lambda$	0
13	0	0	1
14	$\lambda^6 - 2\lambda^4 + \lambda^2 - 1$	$-3\lambda^5 + 9\lambda^3 - 6\lambda$	0
15	$-3\lambda^5 + 9\lambda^3 - 6\lambda$	$\lambda^6 - 2\lambda^4 + \lambda^2 - 1$	-1
16	$3\lambda^4 - 7\lambda^2 + 3$	$-\lambda^5 + \lambda^3 + \lambda$	λ
17	$-4\lambda^6 + 14\lambda^4 - 14\lambda^2 + 4$	$\lambda^7 - 7\lambda^3 + 6\lambda$	$-\lambda$
18	$3\lambda^5 - 7\lambda^3 + 3\lambda$	$-\lambda^6 + \lambda^4 + \lambda^2$	$\lambda^2 - 1$

ماتریس $W^*(B_n, \lambda)$

i	k		
	1	2	3
1	$\lambda^7 - 7\lambda^3 + 6\lambda$	$-4\lambda^6 + 14\lambda^4 - 14\lambda^2 + 4$	λ
2	$-4\lambda^7 + 14\lambda^5 - 16\lambda^3 + 7\lambda$	$\lambda^8 - 6\lambda^4 + 4\lambda^2 + 1$	$-\lambda$
3	$7\lambda^6 - 24\lambda^4 + 24\lambda^2 - 7$	$-2\lambda^7 + 2\lambda^5 + 7\lambda^3 - 7\lambda$	$\lambda^3 - \lambda$

بنابراین داریم:

$$\begin{aligned}\varphi(B_n) &= \varepsilon \cdot \det W^*(B_n, \lambda) \\ &= \lambda^{18} - 21\lambda^{16} + 180\lambda^{14} - 823\lambda^{12} + 2203\lambda^{10} - 3558\lambda^8 + 3430\lambda^6 \\ &\quad - 1868\lambda^4 + 505\lambda^2 - 49\end{aligned}$$

همان طور که مشهود است با استفاده از الگوریتم فوق محاسبه چندجمله ای مشخصه سیستم های بنزنی تا حدودی تسهیل شده است. در ادامه به بهینه سازی محاسبه انرژی برای دسته های خاصی از این سیستم ها خواهیم پرداخت.

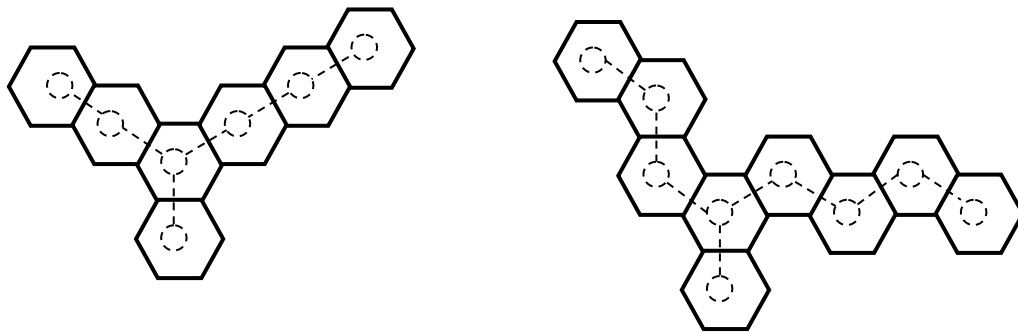
۵-۲. انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی

در این بخش ابتدا به معرفی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی می پردازیم سپس با استفاده از مطالب گفته شده در فصول ۳ و ۴ به یک جمع بندی کلی پرداخته و نتایجی را برای سیستم های شش ضلعی عنکبوتی ارائه می دهیم.

۵-۲-۱. معرفی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی

گراف G را یک درخت عنکبوتی نامیم هرگاه G یک درخت شامل تنها یک رأس از درجه بیشتر از ۲ باشد، چنین رأسی را مرکز گراف گوئیم. سیستم شش ضلعی B را یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی گوئیم هرگاه گراف دوگان درونی، B_c ، مربوط به آن یک درخت عنکبوتی با ماکزیمم درجه ۳ باشد (درجه مرکز B_c ، ۳ باشد). شکل (۵-۳) چند سیستم شش ضلعی عنکبوتی و گراف های دوگان درونی متناظر با آنها را نشان می دهد [۲۰]. اگر S یک درخت عنکبوتی با ماکزیمم درجه ۳ و c مرکز آن باشد؛ آنگاه $S - c$ دارای سه مؤلفه است که هر مؤلفه یک پایه برای S نامیده می شود. فرض کنید B

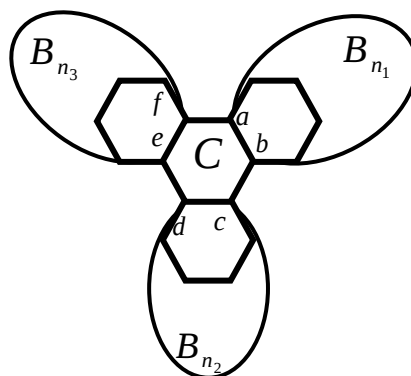
یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی باشد، اگر B_c گراف دوگان درونی آن باشد، آنگاه زنجیرهای شش-ضلعی متناظر با پایه های B_c ، پایه های B می باشند.



شکل (۵-۳). سیستم شش ضلعی عنکبوتی

تعداد شش ضلعی های مشمول در یک پایه طول پایه و شش ضلعی متناظر با مرکز سیستم، شش-ضلعی مرکزی می باشد.

برای اعداد طبیعی n_1, n_2, n_3 سیستم شش ضلعی عنکبوتی با پایه های به طول n_1, n_2, n_3 را با $S(n_1, n_2, n_3)$ نشان می دهیم. توجه داشته باشید که سیستم های شش ضلعی عنکبوتی غیرایزومورف ممکن است گراف دوگان درونی ایزومورف داشته باشند [۲۰].



شکل (۵-۴). سیستم شش ضلعی عنکبوتی $S(n_1, n_2, n_3)$

از این پس همه سیستم های شش ضلعی عنکبوتی را با (n_1, n_2, n_3) نشان می دهیم، و برای $S(n_1, n_2, n_3) \in \zeta(n_1, n_2, n_3)$ را به عنوان پایه های سیستم در نظر می گیریم.

اگر هر ۳ پایه سیستم $S(n_1, n_2, n_3)$ زنجیر خطی باشند، آنگاه سیستم را سیستم شش ضلعی عنکبوتی خطی نامیده و با $L(n_1, n_2, n_3)$ نشان می دهیم.

اگر هر ۳ پایه سیستم $S(n_1, n_2, n_3)$ زنجیر زیگ-زاگی باشند، آنگاه سیستم را سیستم شش ضلعی عنکبوتی زیگ-زاگی نامیده و با $Z(n_1, n_2, n_3)$ نشان می دهیم.

در اینجا یک نشانه گذاری دیگر برای متمایز کردن سیستم های شش ضلعی عنکبوتی زیگ-زاگی ارائه می دهیم.

فرض کنید $S(n_1, n_2, n_3)$ یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی زیگ-زاگی باشد و طول یکی از پایه های آن n باشد. زنجیر شش ضلعی شکل گرفته به وسیله شش ضلعی مرکزی و دو شش ضلعی اول پایه مذکور را در نظر بگیرید، اگر این زنجیر در جهت خلاف عقربه های ساعت حرکت کرده باشد، آنگاه گوییم این پایه یک پایه مثبت به طول n^+ و در غیر این صورت پایه را منفی به طول n^- گوییم.

بنابراین یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی زیگ-زاگی را با $Z(n_1^a, n_2^b, n_3^c)$ نشان می دهیم، که $a, b, c \in \{+, -\}$ هستند. اگر $a = b = c$ ، آنگاه سیستم را منتظم گوییم و آن را با نماد $RZ^a(n_1, n_2, n_3)$ نشان می دهیم [۲۰].

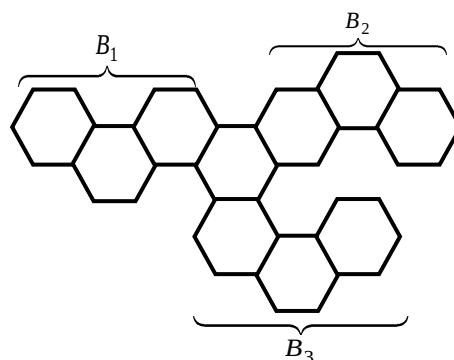
۵-۲-۲. انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی

در این قسمت با به کارگیری مطالب گفته شده در فصل های پیشین به بررسی انرژی این سیستم ها

می پردازیم. از آنجا که محاسبه انرژی چنین سیستم هایی نیاز به محاسبات طولانی دارد، لذا برنامه ای برای محاسبه انرژی آنها طراحی شد که در پیوست آورده شده است.

نتیجه ۵-۱: فرض کنید G یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی باشد، در این صورت هر چه تعداد پایه های زیگ-زاگی بیشتر باشد انرژی سیستم بیشتر است.

اثبات: فرض کنید گراف G گراف مربوط به یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی باشد، که شش ضلعی های موجود در آن مانند فصل ۳ با A_2 و L_2 نامگذاری شده اند. همان طور که در این فصل گفته شد هر چه تعداد شش ضلعی ها به فرم A_2 در سیستم بیشتر باشد انرژی سیستم بیشتر است، لذا نتیجه حاصل می شود. $\square$



شکل (۵-۵)

اما در حالتی که دو سیستم با تعداد شش ضلعی های به فرم A_2 یکسان داریم تشخیص بیشترین مقدار انرژی مشکل خواهد بود. استفاده از نتیجه (۵-۲) این امر را میسر خواهد نمود.

قبل از ذکر نتیجه (۵-۲) ذکر دو لم از فصل های گذشته الزامی است:

لم ۵-۱: اگر G یک گراف با دو مؤلفه G_1 و G_2 باشد، آنگاه:

$$\varphi_G = \varphi_{G_1} \cdot \varphi_{G_2} \quad (۴-۵)$$

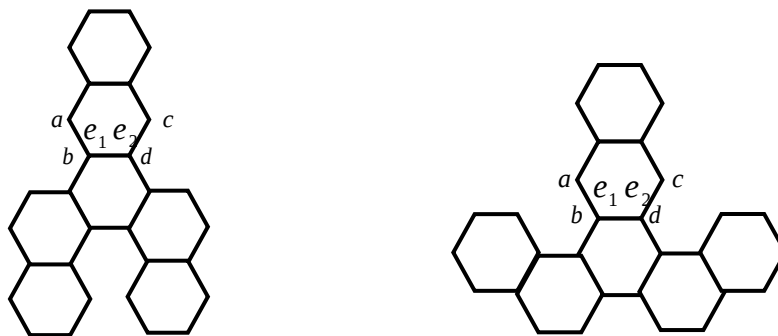
لم ۲-۵: اگر G یک گراف باشد، آنگاه:

$$\varphi(G) = \varphi(G - uv) - \varphi(G - u - v) - 2 \sum_{C \in C_{uv}} \varphi(G - C) \quad (۵-۵)$$

که در آن $\varphi(G - uv)$ و $\varphi(G - u - v)$ به ترتیب گراف های حاصل از حذف یال uv و رئوس u و v ، و C_{uv} مجموعه دورهای شامل یال uv است [۴].

نتیجه ۲-۵: اگر دو سیستم شش ضلعی عنکبوتی با تعداد شش ضلعی های به فرم A_2 یکسان داشته باشیم، در حالتی که زنجیرهای زیگ-زاگی تشکیل یک زنجیر حلقوی می دهند انرژی کمتر خواهد بود.

اثبات: اگر G یک سیستم شش ضلعی عنکبوتی دلخواه باشد، با توجه به شکل (۵-۶) برای محاسبه انرژی آن داریم:



شکل (۵-۶)

یال های e_1 ، e_2 را که در شکل نشان داده شده است، در نظر بگیرید. با استفاده از لم (۲-۵) برای

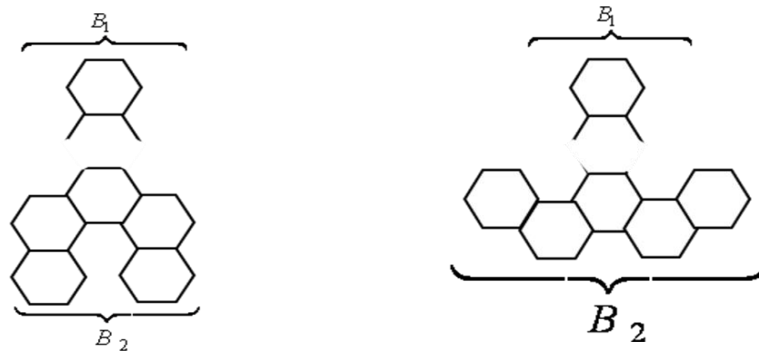
یال e_1 داریم:

$$\varphi(G) = \varphi(G - e_1) - \varphi(G - a - b) - 2 \sum_{C \in C_{ab}} \varphi(G - C)$$

حال اگر گراف حاصل از حذف یال e_1 یعنی $G - e_1$ را G_1 بنامیم، مجدداً با اعمال لم (۵-۲) برای یال e_2 داریم:

$$\varphi(G) = \left[\varphi(G_1 - e_2) - \varphi(G_1 - c - d) - 2 \sum_{C \in C_{cd}} \varphi(G_1 - C) \right] - \varphi(G - a - b) - 2 \sum_{C \in C_{ab}} \varphi(G - C)$$

حال توجه داریم که گراف G_2 (گراف حاصل از حذف یال های e_1 ، e_2) برای هر یک از شکل های موجود در شکل (۵-۶) دارای دو زیرگراف مجزا به شکل زیر می باشند:



شکل (۵-۷).

از آنجا که گراف G_2 شامل دو مؤلفه B_1 و B_2 است، لذا با استفاده از لم (۵-۱) برای آن خواهیم داشت:

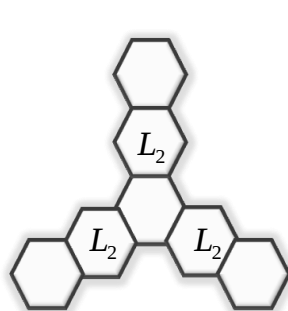
$$\varphi(G) = \left[[\varphi(B_1) \times \varphi(B_2)] - \varphi(G_1 - c - d) - 2 \sum_{C \in C_{cd}} \varphi(G_1 - C) \right] - \varphi(G - a - b) - 2 \sum_{C \in C_{ab}} \varphi(G - C)$$

بنابراین هر چه مقدار انرژی این دو مؤلفه بیشتر باشد، انرژی کل بیشتر است.

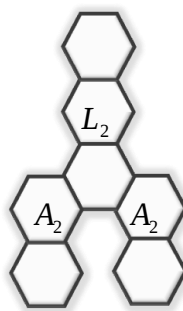
لذا با توجه به قضایای اثبات شده برای بیشترین و کمترین مقدار انرژی در فصل ۴، در حالتی که پایه ها زیگ-زاگی می باشند، اگر این زنجیرها تشکیل زنجیر حلقوی بدهند، مقدار انرژی کمتر خواهد بود. □

مثال ۵-۲: گراف های نشان داده شده در شکل (۵-۸) را در نظر بگیرید، با بکار بردن نتیجه (۵-۲) برای آنها و با توجه به مقادیر محاسبه شده برای انرژی این سیستم ها با استفاده از برنامه موجود در ضمیمه، رابطه ترتیبی زیر به دست خواهد آمد.

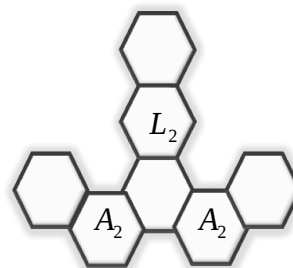
$$G_1 \preceq G_2 \preceq G_3 \Rightarrow E_{\pi}(G_1) \leq E_{\pi}(G_2) \leq E_{\pi}(G_3)$$



G_1
 $E_{\pi} = 42.2903$



G_2
 $E_{\pi} = 42.3865$



G_3
 $E_{\pi} = 42.3899$

شکل (۵-۸)

۵-۳. ارائه روش بهینه برای محاسبه انرژی

در این بخش سعی داریم یک روش بهینه برای محاسبه مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف و در نتیجه انرژی مربوط به زنجیرهای شش ضلعی ارائه دهیم، این روش بر پایه تجزیه گراف به عوامل و مؤلفه های متقارن و یکریخت بنا شده است.

۵-۳-۱. گراف متقارن و مؤلفه های آن

اگر G یک گراف ساده باشد به طوری که بتوان آنرا به دو مؤلفه کاملاً یکسان تجزیه کرد، گراف را متقارن می نامیم. از آنجا که در بحث ما نیز این امکان وجود دارد که با شکستن یال ها، بعضی از سیستم ها (از جمله برخی زنجیرها) به دو مؤلفه یکریخت تبدیل شوند، لذا گراف مربوط به این سیستم ها را نیز متقارن نامیده و نشان می دهیم این روش برای این گراف ها قابل استفاده می باشد.

فرض کنید G گرافی از نوع B_n باشد با توجه به اینکه تعداد رئوس آن زوج است، لذا اگر شماره گذاری را طوری انجام دهیم که با این کار گراف به دو مؤلفه یکریخت تبدیل شود، بطوری که رئوس شماره 1 تا $\frac{n}{2}$ در مؤلفه اول و رئوس شماره $\frac{n}{2} + 1$ تا n در مؤلفه دوم و رئوس متناظر $\frac{n}{2}$ اختلاف داشته باشند، آنگاه با شکستن یالهای مرتبط گراف به دو مؤلفه G_1, G_2 تقسیم می شود [۲۱، ۲۲].

اگر A_{G_1}, A_{G_2} به ترتیب ماتریس مجاورت گراف های G_1, G_2 باشند، خواهیم داشت:

$$A_{G_1} = A_1 = [H] + [H'] \quad , \quad A_{G_2} = A_2 = [H] - [H'] \quad (۵-۶)$$

که H' ماتریس مجاورت گراف مربوط به یال های انتقالی (یال های حاصل از انتقال یال های برشی به رئوس مربوطه) و H گراف مربوط به مؤلفه های یکریخت بدون در نظر گرفتن یال های انتقالی در G است. یک گراف با n رأس (n عددی صحیح و زوج)، که دارای یک ماتریس مجاورت از مرتبه $n \times n$ است، به دو ماتریس از مرتبه $\frac{n}{2}$ تبدیل می شود. این موضوع با استفاده از قضیه زیر قابل اثبات است [۲۲، ۲۳].

قضیه ۵-۱: اگر A_1, A_2 دو ماتریس مجاورت متناظر با G_1, G_2 باشند و

$$A_1 = [H] + [H'] \quad , \quad A_2 = [H] - [H']$$

$$\lambda(A_G) = \lambda(A_1) \cup \lambda(A_2) \text{ آنگاه } , A_G = \begin{bmatrix} H_{\frac{n}{2} \times \frac{n}{2}} & H'_{\frac{n}{2} \times \frac{n}{2}} \\ H'_{\frac{n}{2} \times \frac{n}{2}} & H_{\frac{n}{2} \times \frac{n}{2}} \end{bmatrix} \text{ و}$$

اثبات: ماتریس A_G را در نظر بگیرید. با اضافه کردن سطر دوم آن به سطر اول و کم کردن ستون

اول از ستون دوم داریم:

$$\det A_G = \begin{vmatrix} H & H' \\ H' & H \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} H+H' & H+H' \\ H' & H \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} H+H' & 0 \\ H' & H-H' \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow \det A_G = \det (H+H') \times \det (H-H')$$

از آنجا که $A_1 = H+H'$, $A_2 = H-H'$ لذا خواهیم داشت:

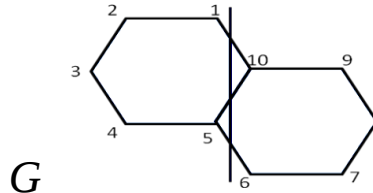
$$\lambda(A_G) = \lambda(A_1) \cup \lambda(A_2) \Rightarrow \det A_G = \det A_1 \times \det A_2$$

مثال ۵-۳: گراف زیر را در نظر بگیرید همان طور که می بینید این گراف دارای ۱۰ رأس و مجموعه

برش یالی متشکل از ۳ یال برشی $\{(1,10), (10,5), (5,6)\}$ می باشد (شکل زیر را برشی از یک سیستم

مقارن در نظر بگیرید، عملیات نشان داده شده برای هر تعداد از این شش ضلعی ها امکان پذیر

است).



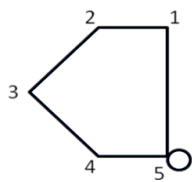
شکل (۵-۹). نمایش گراف مقارن

ماتریس مجاورت این گراف یک ماتریس 10×10 است. که به همراه مؤلفه های ایزومورف آن در زیر

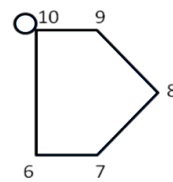
آورده شده اند.

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

باید توجه کنیم که در هنگام انتقال یال های برشی بین دو مؤلفه، به رئوس متناظر، درجه هر رأس باید حفظ شود (هر حلقه (طوقه) به عنوان یک درجه برای رأس مربوطه در نظر گرفته می شود).



G_1



G_2

شکل (۵-۱۰)

در ماتریس مجاورت گراف G_1 علامت رئوس انتقالی مثبت و در G_2 منفی می باشد. (ماتریس های

A_1, A_2). به این ماتریس ها و مقادیر ویژه آنها توجه کنید.

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad H' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_{A_1} = \{2.30278, 1.61803, -1.30278, 1, 0.618034\}$$

$$\lambda_{A_2} = \{-2.30278, -1.61803, 1.30278, -1, -0.618034\}$$

با توجه به مقادیر ویژه ماتریس اولیه که عبارت است از:

$$\pm 2.30278, \pm 1.61803, \pm 1.30278, \pm 1, \pm 0.618034$$

لذا خواهیم داشت :

$$\lambda_A = \lambda_{A_1} \cup \lambda_{A_2}$$

□

از آنجا که گراف مربوط به سیستم های شش ضلعی گراف هایی دوبخشی می باشند، لذا مقادیر ویژه آنها دو به دو قرینه اند لذا مقادیر ویژه ماتریس های $A_1 = H + H'$ و $A_2 = H - H'$ قرینه اند [۲۴، ۲۵]، و ابعاد هر یک از دو ماتریس A_1 و A_2 دقیقاً نصف بعد ماتریس اصلی می باشد و با توجه به اینکه مقادیر ویژه این دو زیرماتریس قرینه می باشند، لذا محاسبات برای پیدا کردن مقادیر ویژه ماتریس اصلی کاهش (به نصف) می یابد.

ما از این خاصیت استفاده نمودیم و با استفاده از نرم افزار Mathematica حجم محاسبات را تا حدود زیادی کاهش دادیم.

لازم به ذکر است که این روش برای همه ی سیستم ها و گراف هایی که دارای چنین تقارنی باشند، قابل اجرا است.

۴-۵. نتیجه گیری و چشم انداز آینده

از آنجا که سیستم های بنزنی بسیار متنوع می باشند، لذا بررسی انرژی و ارائه روشی یکسان برای محاسبه انرژی همه انواع سیستم ها کاری پیچیده می باشد، بنابراین با دسته بندی آنها راحت تر به نتیجه خواهیم رسید.

در این پایان نامه بخش کوچکی از این سیستم ها را بررسی، و برای هر دسته یک روابط ترتیبی که برای آنها موجود بود بررسی شد، در بخش پایانی نیز به بهینه سازی محاسبات پرداخته شد. با توجه به الگوریتمی که در ابتدای فصل گفته شد، محاسبه انرژی برای سیستم های کوچک تا حدودی ساده می باشد. اما برای سیستم های پیچیده با توجه به تعداد زیاد شش ضلعی ها و در نتیجه رئوس، با مشکل رو به رو هستیم.

از این رو تلاش بر این است که روشی برای این محاسبات ارائه شود، بدین منظور اگر بتوان روش ذکر شده در انتهای این فصل را برای چنین سیستم هایی تعمیم داد حجم محاسبات کاهش می یابد.

ولی توجه داریم که روش ذکر شده برای سیستم های متقارن عملی است، لذا برای محاسبه انرژی سیستم هایی که دارای چنین تقارنی نباشند، هنوز مشکل باقیست. بنابراین باید روشی کاربردی تر ارائه داد. از این رو طراحی الگوریتم برای این محاسبات به نظر کارا تر خواهد بود.

برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی

در این برنامه انرژی دسته ای از سیستم های کاتاکاندنس موسوم به سیستم های شش ضلعی عنکبوتی محاسبه می شود، به این صورت که تعداد شش ضلعی های موجود در سیستم و تعداد شش ضلعی های سازنده پایه به عنوان ورودی بوده و به صورت n_1, n_2, n_3 برای پایه های خطی و z_1, z_2, z_3 برای پایه های زیگ-زاگی برای سیستم تعریف می شوند، که این مقادیر در بخش (۵)- (۲) تعریف شده اند، لازم به ذکر است که پایه ها می توانند مقادیر صفر، یا برای پایه های زیگ-زاگی مقادیر منفی بگیرند. در نهایت سیستم مقادیر ویژه و انرژی گراف را به عنوان خروجی نمایش می-دهد. لازم به ذکر است که این برنامه با استفاده از نرم افزار مطلب قابل اجرا می باشد.

```
clc
```

```
%%In the name of God
```

```
%% Input Data
```

```
% Enter h , L(n1,n2,n3) , Z(z1,z2,z3),by integers : h>=1 , n>=0 & z
```

```
h=1;
```

```
n1=0; z1=0;
```

```
n2=0; z2=0;
```

```
n3=0; z3=0;
```

```
M = zeros ([4*(h-1)+6,4*(h-1)+6]);
```

```
h1=0;
```

```
e=0;
```

```
h
```

```
L=[n1,n2,n3]
```

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

```
Z=[z1,z2,z3]

if (abs (n1)+abs (n2)+abs (n3)+abs (z1)+abs (z2)+abs (z3) ~=h-1)

    Note='"h" must be one more than the sum of the branche
molecules.please enter truthfully !! '

    break

end

if (n1<0||n2<0||n3<0)|| (n1~=0&&z1~=0)|| (n2~=0&&z2~=0)|| (n3~=0&&z3~=0)

    HeyMan='        It is not true.It is Terrible !!!!!!!!!!!!!!!'

    Break

end

%% Task ONE

if (z1==0 && z2==0 && z3==0)

%% First branch n1~=0

    for i=1:1:4*n1+2;

        M(i,i+1)=1;

        M(i+1,i)=1;

    end

    i=1;

    j=4*n1+2;

    while (i<=2*n1-1) && (j>=2*n1+4)

        M(i,j)=1;

        M(j,i)=1;

        i=i+2;

        j=j-2;

    end

end
```

```
%% Second branch n2~=0
```

```
for i=4*n1+3:1:4*(n1+n2)+4;
```

```
    M(i,i+1)=1;
```

```
    M(i+1,i)=1;
```

```
end
```

```
i=4*n1+3;
```

```
j=4*(n1+n2)+4;
```

```
while (i<=4*n1+2*n2+1) && (j>=4*n1+2*n2+6)
```

```
    M(i,j)=1;
```

```
    M(j,i)=1;
```

```
    i=i+2;
```

```
    j=j-2;
```

```
end
```

```
%% Third branch n3~=0
```

```
for i=4*(n1+n2)+5:1:4*(n1+n2+n3)+5;
```

```
    M(i,i+1)=1;
```

```
    M(i+1,i)=1;
```

```
end
```

```
i=4*(n1+n2)+5;
```

```
j=4*(n1+n2+n3)+6;
```

```
while (i<=4*(n1+n2)+2*n3+3) && (j>=4*(n1+n2)+2*n3+8)
```

```
    M(i,j)=1;
```

```
    M(j,i)=1;
```

```
    i=i+2;
```

```
    j=j-2;
```

```
end
```

```
M(4*(n1+n2+n3)+6,1)=1;
```

```
M(1,4*(n1+n2+n3)+6)=1;
```

%Output

[E]=svd(M);

for i=1:1:4*(h-1)+6;

e=e+E(i);

end

AdjacencyMatrix=M

AbslutEigenValues=E

PiElectronEnergy=e

TaskNumber='ONE'

break

end

%% Task TWO

if (n1==0 && n2==0 && n3==0) && ((z1>=0 && z2>=0 && z3>=0)|| (z1<=0 && z2<=0 && z3<=0))

if (z1<=0 && z2<=0 && z3<=0)

z1=-z1;

h1=-z2;

z2=-z3;

z3=h1;

end

%% First branch

for i=1:1:4*z1+2;

M(i,i+1)=1;

M(i+1,i)=1;

end

i=4;

j=4*z1+1;

```
while (i<=2*z1) && (j>=2*z1+5)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(1,4*z1+2)=1;

M(4*z1+2,1)=1;

%% Second branch

for i=4*z1+3:1:4*(z1+z2)+4;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4*z1+6;

j=4*(z1+z2)+3;

while (i<=4*z1+2*z2+2) && (j>=4*z1+2*z2+7)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*z1+3,4*(z1+z2)+4)=1;

M(4*(z1+z2)+4,4*z1+3)=1;
```

```
%% Third branch

for i=4*(z1+z2)+5:1:4*(z1+z2+z3)+5;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4*(z1+z2)+8;

j=4*(z1+z2+z3)+5;

while (i<=4*(z1+z2)+2*z3+4) && (j>=4*(z1+z2)+2*z3+9)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*(z1+z2+z3)+6,4*(z1+z2)+5)=1;

M(4*(z1+z2)+5,4*(z1+z2+z3)+6)=1;

M(4*(z1+z2+z3)+6,1)=1;

M(1,4*(z1+z2+z3)+6)=1;

%Output

[E]=svd(M);

for i=1:1:4*(h-1)+6;

    e=e+E(i);

end

AdjacencyMatrix=M

AbsoluteEigenValues=E

PiElectronEnergy=e
```

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

```
TaskNumber='TWO'

break

end

%% Task THREE

if (z1==0 && n2~=0 && z3>0) || (z1==0 && z2<0 && n3~=0) || (z1>0 && n2~=0
&& n3~=0) || (z1==0 && n2~=0 && z3<0) || (z1==0 && z2>0 && n3~=0) || (z1<0
&& n2~=0 && n3~=0)

    if (z1==0 && z2<0 && n3~=0)

        z3=-z2;

        n2=n1;

        n1=n3;

    end

    if (z1>0 && n2~=0 && n3~=0)

        z3=z1;

        n1=n2;

        n2=n3;

    end

    if (z1==0 && n2~=0 && z3<0)

        z3=-z3;

        h1=n1;

        n1=n2;

        n2=h1;

    end

    if (z1==0 && z2>0 && n3~=0)

        z3=z2;

        n2=n3;

    end

    if (z1<0 && n2~=0 && n3~=0);

        z3=-z1;

        n1=n3;
```

```
end

%% First branch n1~=0
for i=1:1:4*n1+2;
    M(i,i+1)=1;
    M(i+1,i)=1;
end

i=1;
j=4*n1+2;
while (i<=2*n1-1) && (j>=2*n1+4)
    M(i,j)=1;
    M(j,i)=1;
    i=i+2;
    j=j-2;
end

%% Second branch n2~=0
for i=4*n1+3:1:4*(n1+n2)+4;
    M(i,i+1)=1;
    M(i+1,i)=1;
end

i=4*n1+3;
j=4*(n1+n2)+4;
while (i<=4*n1+2*n2+1) && (j>=4*n1+2*n2+6)
    M(i,j)=1;
    M(j,i)=1;
    i=i+2;
    j=j-2;
end

%% Third branch
```

```
for i=4*(n1+n2)+5:1:4*(n1+n2+z3)+5;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4*(n1+n2)+8;

j=4*(n1+n2+z3)+5;

while (i<=4*(n1+n2)+2*z3+4) && (j>=4*(n1+n2)+2*z3+8)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*(n1+n2+z3)+6,4*(n1+n2)+5)=1;

M(4*(n1+n2)+5,4*(n1+n2+z3)+6)=1;

M(4*(n1+n2+z3)+6,1)=1;

M(1,4*(n1+n2+z3)+6)=1;

%Output

[E]=svd(M);

for i=1:1:4*(h-1)+6;

    e=e+E(i);

end

AdjacencyMatrix=M

AbslutEigenValues=E

PiElectronEnergy=e

TaskNumber='THREE'
```

```
break

end

%% Task FOUR

if (n1==0 && n2==0 && n3==0)&&((z1>0 && z2>0 && z3<0)|| (z1>0 && z2<0
&& z3>=0)|| (z1>0 && z2<=0 && z3<0)|| (z1<0 && z2>=0 && z3>0)|| (z1<0 &&
z2>0 && z3<=0)|| (z1<=0 && z2<0 && z3>0))

    if (z1>0 && z2>0 && z3<0)

        z3=-z3;

    end

    if (z1>0 && z2<0 && z3>=0)

        h1=z3;

        z3=-z2;

        z2=z1;

        z1=h1;

    end

    if (z1>0 && z2<=0 && z3<0)

        z2=-z2;

        h1=z1;

        z1=-z3;

        z3=h1;

    end

    if (z1<0 && z2>=0 && z3>0)

        h1=-z1;

        z1=z2;

        z2=z3;

        z3=h1;

    end

    if (z1<0 && z2>0 && z3<=0)

        z1=-z1;
```

```
h1=z2;

z2=-z3;

z3=h1;

end

if (z1<=0 && z2<0 && z3>0)

h1=-z1;

z1=-z2;

z2=h1;

end

%% First branch

for i=1:1:4*z1+2;

M(i,i+1)=1;

M(i+1,i)=1;

end

i=4;

j=4*z1+1;

while (i<=2*z1) && (j>=2*z1+5)

M(i,j)=1;

M(j,i)=1;

M(i+1,j-3)=1;

M(j-3,i+1)=1;

i=i+4;

j=j-4;

end

M(1,4*z1+2)=1;

M(4*z1+2,1)=1;

%% Second branch

for i=4*z1+3:1:4*(z1+z2)+4;
```

```
M(i,i+1)=1;

M(i+1,i)=1;

end

i=4*z1+6;

j=4*(z1+z2)+3;

while (i<=4*z1+2*z2+2) && (j>=4*z1+2*z2+7)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*z1+3,4*(z1+z2)+4)=1;

M(4*(z1+z2)+4,4*z1+3)=1;

%% Third branch

for i=4*(z1+z2)+5:1:4*(z1+z2+z3)+5;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4*(z1+z2)+6;

j=4*(z1+z2+z3)+3;

while (i<=4*(z1+z2)+2*z3+2) && (j>=4*(z1+z2)+2*z3+7)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+3,j-1)=1;

    M(j-1,i+3)=1;

    i=i+4;
```

```
j=j-4;

end

M(4*(z1+z2+z3)+6,4*(z1+z2)+5)=1;

M(4*(z1+z2)+5,4*(z1+z2+z3)+6)=1;

M(4*(z1+z2+z3)+6,1)=1;

M(1,4*(z1+z2+z3)+6)=1;

%Output

[E]=svd(M);

for i=1:1:4*(h-1)+6;

    e=e+E(i);

end

AdjacencyMatrix=M

AbsoluteEigenValiu=E

PiElectronEnergy=e

TaskNumber='FOUR'

break

end

%% Task FIVE

if (z1>0 && z2>=0 && n2==0 && n3~=0)|| (z1>0 && n2~=0 && z3>=0 &&
n3==0)|| (n1~=0 && z2>=0 && n2==0 && z3>0)|| (z1<0 && z2<=0 && n2==0 &&
n3~=0)|| (z1<0 && n2~=0 && z3<=0 && n3==0)|| (n1~=0 && z2<=0 && n2==0 &&
z3<0)

    if (z1>0 && n2~=0 && z3>=0)

        n3=n2;

        z2=z1;

        z1=z3;

    end

    if (n1~=0 && z2>=0 && z3>0)
```

```
n3=n1;

z1=z2;

z2=z3;

end

if (z1<0 && z2<=0 && n3~=0)

    h1=-z1;

    z1=-z2;

    z2=h1;

end

if (z1<0 && n2~=0 && z3<=0)

    z1=-z1;

    n3=n2;

    z2=-z3;

end

if (n1~=0 && z2<=0 && z3<0)

    z2=-z2;

    n3=n1;

    z1=-z3;

end

%% First branch

for i=1:1:4*z1+2;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4;

j=4*z1+1;

while (i<=2*z1) && (j>=2*z1+5)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;
```

```
M(i+1,j-3)=1;

M(j-3,i+1)=1;

i=i+4;

j=j-4;

end

M(1,4*z1+2)=1;

M(4*z1+2,1)=1;

%% Second branch

for i=4*z1+3:1:4*(z1+z2)+4;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

End

i=4*z1+6;

j=4*(z1+z2)+3;

while (i<=4*z1+2*z2+2) && (j>=4*z1+2*z2+7)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*z1+3,4*(z1+z2)+4)=1;

M(4*(z1+z2)+4,4*z1+3)=1;

%% Third branch n3~=0

for i=4*(z1+z2)+5:1:4*(z1+z2+n3)+5;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end
```

```
i=4*(z1+z2)+5;
j=4*(z1+z2+n3)+6;
while (i<=4*(z1+z2)+2*n3+3) && (j>=4*(z1+z2)+2*n3+8)
    M(i,j)=1;
    M(j,i)=1;
    i=i+2;
    j=j-2;
end
M(4*(z1+z2+n3)+6,1)=1;
M(1,4*(z1+z2+n3)+6)=1;

%Output
[E]=svd(M);
for i=1:1:4*(h-1)+6;
    e=e+E(i);
end
AdjacencyMatrix=M
AbsoluteEigenValue=E
PiElectronEnergy=e
TaskNumber='FIVE'
break
end

%% Task SIX

if (z1>0 && z2<0 && n3~=0)|| (z1<0 && n2~=0 && z3>0)|| (n1~=0 && z2>0 &&
z3<=0 && n3==0)

    if (z1>0 && z2<0 && n3~=0)
        z2=-z2;
```

```
end

if (z1<0 && n2~=0 && z3>0)

    n3=n2;

    z2=-z1;

    z1=z3;

end

if (n1~=0 && z2>0 && z3<=0)

    n3=n1;

    z1=z2;

    z2=-z3;

end

%% First branch

for i=1:1:4*z1+2;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

End

i=4;

j=4*z1+1;

while (i<=2*z1) && (j>=2*z1+5)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(1,4*z1+2)=1;

M(4*z1+2,1)=1;
```

%% Second branch

*for i=4*z1+3:1:4*(z1+z2)+4;*

M(i,i+1)=1;

M(i+1,i)=1;

end

*i=4*z1+4;*

j=4(z1+z2)+1;*

*while (i<=4*z1+2*z2) && (j>=4*z1+2*z2+5)*

M(i,j)=1;

M(j,i)=1;

M(i+3,j-1)=1;

M(j-1,i+3)=1;

i=i+4;

j=j-4;

end

*M(4*z1+3,4*(z1+z2)+4)=1;*

M(4(z1+z2)+4,4*z1+3)=1;*

%% Third branch n3~=0

for i=4(z1+z2)+5:1:4*(z1+z2+n3)+5;*

M(i,i+1)=1;

M(i+1,i)=1;

end

i=4(z1+z2)+5;*

j=4(z1+z2+n3)+6;*

while (i<=4(z1+z2)+2*n3+3) && (j>=4*(z1+z2)+2*n3+8)*

```

        M(i,j)=1;

        M(j,i)=1;

        i=i+2;

        j=j-2;

    end

    M(4*(z1+z2+n3)+6,1)=1;

    M(1,4*(z1+z2+n3)+6)=1;

%Output

    [E]=svd(M);

    for i=1:1:4*(h-1)+6;

        e=e+E(i);

    end

    AdjacencyMatrix=M

    AbsoluteEigenValue=E

    PiElectronEnergy=e

    TaskNumber='SIX'

    break

end

%% Task SEVEN

%to apply counter clockwise algorithm forme, we let z1>0 that is
together

%with n2~=0 & z1>0

if (z1>0 && n2~=0 && z3<0) || (z1<0 && z2>0 && n3~=0) || (n1~=0 && z2<0 &&
z3>=0 && n3==0)

    if (z1>0 && n2~=0 && z3<0)

        z3=-z3;

    end

    if (z1<0 && z2>0 && n3~=0)

        z1=-z1;

```

```
n2=n3;

z3=z2;

end

if (n1~=0 && z2<0 && z3>=0)

    n2=n1;

    z1=z3;

    z3=-z2;

end

%% First branch

for i=1:1:4*z1+2;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

End

i=4;

j=4*z1+1;

while (i<=2*z1) && (j>=2*z1+5)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+1,j-3)=1;

    M(j-3,i+1)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(1,4*z1+2)=1;

M(4*z1+2,1)=1;

%% Second branch n2~=0

for i=4*z1+3:1:4*(z1+n2)+4;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;
```

```
end

i=4*z1+3;

j=4*(z1+n2)+4;

while (i<=4*z1+2*n2+1) && (j>=4*z1+2*n2+6)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    i=i+2;

    j=j-2;

end

%% Third branch

for i=4*(z1+n2)+5:1:4*(z1+n2+z3)+5;

    M(i,i+1)=1;

    M(i+1,i)=1;

end

i=4*(z1+n2)+6;

j=4*(z1+n2+z3)+3;

while (i<=4*(z1+n2)+2*z3+2) && (j>=4*(z1+n2)+2*z3+7)

    M(i,j)=1;

    M(j,i)=1;

    M(i+3,j-1)=1;

    M(j-1,i+3)=1;

    i=i+4;

    j=j-4;

end

M(4*(z1+n2)+5,4*(z1+n2+z3)+6)=1;

M(4*(z1+n2+z3)+6,4*(z1+n2)+5)=1;

M(4*(z1+n2+z3)+6,1)=1;

M(1,4*(z1+n2+z3)+6)=1;
```

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

%Output

[E]=svd(M);

for i=1:1:4(h-1)+6;*

e=e+E(i);

end

AdjacencyMatrix=M

AbsoluteEigenValue=E

PiElectronEnergy=e

TaskNumber='SEVEN'

end

1:Input:

```
h=2;  
n1=1; z1=0;  
n2=0; z2=0;  
n3=0; z3=0;
```

output:

AbslutEigenValues =

2.3028, 2.3028, 1.6180 , 1.6180 , 1.3028 , 1.3028 , 1.0000 , 1.0000 , 0.6180 , 0.6180

PiElectronEnergy =

13.6832

TaskNumber =

ONE

>>

2:Input:

```
h=3;  
n1=1; z1=0;  
n2=0; z2=0;  
n3=1; z3=0;
```

output:

h = 3

L = 1 0 1

$$Z = 0 \quad 0 \quad 0$$

AdjacencyMatrix =

Columns 1 through 10

0	1	0	0	0	1	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
1	0	0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0

Columns 11 through 14

0	0	0	1
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

0 0 0 1

1 0 0 0

0 1 0 0

1 0 1 0

0 1 0 1

0 0 1 0

AbslutEigenValues =

2.4348 , 2.4348 , 1.9506 , 1.9506 , 1.5163 , 1.5163 , 1.3058 , 1.3058 , 1.1424 , 1.1424 ,
0.7691 , 0.7691 , 0.6052 , 0.6052

PiElectronEnergy =

19.4483

TaskNumber =

ONE

>>

3:Input:

h=3;

n1=0; z1=1;

n2=0; z2=0;

n3=0; z3=1;

output:

h = 3

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

AdjacencyMatrix =

Columns 1 through 10

0	1	0	0	0	1	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
1	0	0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0

Columns 11 through 14

0	0	0	1
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

0 0 0 0

0 0 0 1

1 0 0 0

0 1 0 0

1 0 1 0

0 1 0 1

0 0 1 0

AbsoluteEigenValues =

2.4348 , 2.4348 , 1.9506 , 1.9506 , 1.5163 , 1.5163 , 1.3058 , 1.3058 , 1.1424 , 1.1424 ,
0.7691 , 0.7691 , 0.6052 , 0.6052

PiElectronEnergy =

19.4483

TaskNumber =

TWO

>>

4:Input:

h=4;

n1=0; z1=1;

n2=0; z2=0;

n3=0; z3=-2;

output:

$h = 4$

$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \end{bmatrix}$

AdjacencyMatrix =

Columns 1 through 10

0	1	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0	0	1	0
0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	1	0	0	0	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Columns 11 through 18

0	0	0	0	0	0	0	1
---	---	---	---	---	---	---	---

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	1
0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	0	1	0	1
0	0	1	0	0	0	1	0

AbsoluteEigenValiu =

2.4990 , 2.4990 , 2.1665 , 2.1665 , 1.7008 , 1.7008 , 1.5398 , 1.5398 , 1.2858 , 1.2858 ,
1.2164 , 1.2164 , 0.8753 , 0.8753 , 0.7923 , 0.7923 , 0.5201 , 0.5201

PiElectronEnergy =

25.1922

TaskNumber =

FOUR

>>

5:Input:

h=4;

n1=0; z1=-1;

n2=0; z2=0;

n3=0; z3=2;

output:

h = 4

L = 0 0 0

Z = -1 0 2

AdjacencyMatrix =

Columns 1 through 10

0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

0	0	0	0	0	1	0	0	0	1
0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Columns 11 through 18

0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0
0	1	0	1	0	0	0	1
0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	0	1	0	1
0	0	1	0	0	0	1	0

پیوست((برنامه مربوط به محاسبه انرژی سیستم های شش ضلعی عنکبوتی))

AbsoluteEigenValiu =

2.5070 , 2.5070 , 2.1358 , 2.1358 , 1.7694 , 1.7694 , 1.4142 , 1.4142 , 1.4142 , 1.4142 ,
1.1234 , 1.1234 , 1.0000 , 1.0000 , 0.6622 , 0.6622 , 0.5676 , 0.5676

PiElectronEnergy =

25.1875

TaskNumber =

FOUR

>>

[۱]. ع ایرانمنش، ع ر اشرفی، ا لقمان، ب سلیمانی، ۱۳۸۶ “ اندیس پادماکار-یوان نانو لوله ها و نانو چمبره ها”، سازمان انتشارات جهاد دانشگاهی.

[2]. I. Gutman. (2001), "The energy of a graph: Old and new results", **Springer. Berlin. pp, 196-211.**

[3]. Y. Saad, (1991) "Numerical methods for lang eigenvalue problems. Minneapolis", desember.

[4]. F. Zhang, H. Ren. (2007), "Fully-angular polyhex chains with minimal total π -electron energy", **Journal of mathematical anal. Appl, 326, 1244-1253.**

[5]. H. Sachs, (1940), "Beziehungen zwischen den in einem graphen entaltenen Kreisen und seinem charakteristischen polynom", **Publ. Math. (Debrecen), 11, 201-203.**

[6]. D. Cvetkovie, M. Doob, H. sachs, (1995) " Spectra of graphs – Theory and application". Academic press, New York, 1980; 2nd revised ed. Barch, Heidelberg.

[7]. I. Gutman, B. Zhou, (2006), Laplacian energy of a graph, "Linear algebra and its applications", 414, 29-37.

[8]. I. Gutman(Ed), (1992), "Advanse in the theory of benzenoid hydrocarbons", Topics in the Current Chemistry, Vol. 163, Springer, Berlin.

[9]. I. Gutman, (1977), "Topological properties of bensenoid systems", **Chim. Acta (Berl), 45, 309-315.**

- [10]. Kh. Salem, (2006), "All the circuits of a catacondensed benzenoid system are conjugated", **J.Molecular structure: THEOCHEM**, **767**, **189-191**.
- [11]. J. Rada, (2005), "Energy ordering of catacondensed hexagonal systems", **Discrete Appl Math.** **145**, **437-443**.
- [12]. I. Gutman, S.J. Cyvin, (1989), "A new method for the calculation of the sextet polynomial of unbranched catacondensed benzenoid hydrocarbons", **Bull. Chem. Soc. Jpn.** **62**, **1250-1252**.
- [13]. H. Hua, M. Wang, (2007), Unicyclic graphs with given number of pendent vertices and minimal energy, "Linear algebra and its applications". 426, 478-489.
- [۱۴]. رالف گریمالدی، ۱۳۸۵، "ریاضیات گسسته و ترکیباتی از دیدگاه کاربردی"، جلد اول، ع عمیدی، چاپ پنجم، مرکز نشر دانشگاهی.
- [15]. I. Gutman, (1978), "The energy of a graph". **Ber. Math-Statist. Sect. Forschungszentrum graz**, **103**, **1-22**.
- [16]. F. Zhang, Z. Li, L. Wang, (2001), "Hexagonal chains with minimal total π -electron energy". **Chem Phy let** **337**, **125-130**.
- [17]. I. Gutman, O.E. Polansky, (1986), "Mathematical consepts in organic chemistry", **Springer (Berlin)**.
- [18]. F. Zhang, Z. Li, L. Wang, (2001), "Hexagonal chains with maximal total π -electron energy", **Chem Phy let**, **337**, **131-137**.
- [19]. F. Zhang, H. Ren, (2007), "Double hexagonal chains with minimal total π -electron energy", **Journal of mathematical chemistry**, **Vol. 42** **November**.

- [20]. W.C. Shiu, (2008), "Extremal Hosoya index and Merrifield-Simmons index of hexagonal spiders", **Discrete appl math**, 156, 2978-2985.
- [21]. X. Li, J. Zhang, (2002), On bicyclic graphs with maximal energy. "Linear algebra and its applications". 427, 87-98.
- [22]. S. Rahimi, A. Elyasi, (2007), "An efficient method for identifying Laplacian spectrum", In: Proceedings of 38th Iranian. Mathematics Conference, Zanjan, Iran.
- [23]. A. Kaveh, M.A. Sayarinejad, (2003), "Eigenvalues of matrices with special patterns using symmetry of graphs", Scientica Iranica.
- [24]. J.A. de ia Pena, L. Mendoza, J. Rada, (2005), "Comparing momenta and π -electron energy of benzenoid molecules". **Discrete math**. 302, 77-84.
- [25]. N. Biggs, (1974), "Algebraic graph theory", Combridge university

فهرست علائم

$G(n, m)$	گرافی با n رأس و m یال
$E(G)$	مجموعه یال های گراف G
$V(G)$	مجموعه رئوس گراف G
λ_i	مقدار ویژه
$A(G)$	ماتریس مجاورت
$E_\pi(G)$	انرژی گراف
$LE_\pi(G)$	انرژی لاپلاسین گراف
$c\mathcal{C}$	سیستم بنزنی کاتا کاندنس
$p\mathcal{C}$	سیستم بنزنی پری کاندنس
$NBCCB$	سیستم بنزنی کاتا کاندنس بدون شاخه
B_n	سیستم بنزنی
$BB_G(X)$	چندجمله ای مشخصه شش گانه
$r(G, k)$	تعداد راههای انتخاب k شش ضلعی مشترکاً رزونانت
$P_T(X)$	چندجمله ای مشخصه درخت
$P(T, k)$	تعداد راههای انتخاب k یال غیرمجزا
$G - uv$	گراف حاصل از حذف یال uv
$G - u$	گراف حاصل از حذف رأس u
$C_{uv}(G)$	دورهای موجود در G شامل uv

$C_u(G)$	دوره‌های موجود در G شامل u
C_l	دوری به طول l
$ID(G)$	گراف دوگان درونی
$d(u)$	درجه رأس u
$\wp$	گراف‌هایی با ماکزیمم درجه ۳
$m_{22}(G)$	تعداد یال‌های G با رئوس انتهایی از درجه ۲
$l_2(G)$	تعداد شش ضلعی‌های نوع l_2 موجود در سیستم CC
$a_2(G)$	تعداد شش ضلعی‌های نوع a_2 موجود در سیستم CC
$a_3(G)$	تعداد شش ضلعی‌های نوع a_3 موجود در سیستم CC
$B_n(V_3)$	زیر گراف شامل رئوس درجه ۳ در سیستم شش ضلعی
IB_n	مجموعه زنجیرهای شش ضلعی
Z_n	زنجیر زیگ-زاگی
L_n	زنجیر خطی
H_n	زنجیر حلقوی
$D_{2 \times n}$	زنجیر شش ضلعی دو گانه با n نفتالن
$S(n_1, n_2, n_3)$	سیستم شش ضلعی عنکبوتی

واژه نامه انگلیسی

Adjacency matrix	ماتریس مجاورت
Alternate	متناوب
Annelated L-mode	اتصال به فرم L
Annelated A-mode	اتصال به فرم A
Angular ring	حلقه گوشه ای
Average vertex degree	میانگین درجه رأسی
Benzenoid system	سیستم بنزنی
Bipartite graph	گراف دوبخشی
Branched	شاخه دار
Cata-condensed	سیستم کاتاکاندنس
Centeroid induced graph	گراف القایی مرکزی
Characteristic polynomial	چندجمله ای مشخصه
Circuit	مدار
Co-spectral	هم- طیف
Code	کد
Complement	متمم
Component	مؤلفه
Conjugated hydrocarbons	هیدروکربن های جفت شده

Connected graph	گراف همبند
Cycle	دور
Double bounds	کران های دوگانه
Double edges	یالهای دوگانه
Double hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی دوگانه
Empty	خالی
Energy of graph	انرژی گراف
Fixed edge	Fully یال ثابت
angular polyhex chain	زنجیرهای شش ضلعی کاملاً گوشه ای
Helicene chain	زنجیر حلقوی
Hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی
Hexagonal spider	شش ضلعی عنکبوتی
Hexagonal system	سیستم شش ضلعی
Identifying	تلفیق
Incident edge	یال مجاور
Induced cycle	دور القایی
Inner dual graph	گراف دوگان درونی
Interior edge	یال درونی
Interior vertex	رأس درونی
Isolated vertex	رأس تنها
Isomorphic	ایزومورف
Kekule structure	جورسازی کامل

Kekulean graph	گرافی با یک جورسازی کامل
Laplacian energy of graph	انرژی لاپلاسین گراف
Laplacian matrix	ماتریس لاپلاسین
Linear chain	زنجیر خطی
Linear ring	M- حلقه خطی
tuple hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی ام- تایی
Monotonous function	تابع یکنوا
Mutually resonant	مشترکا رزونانت
Naphthalene	نفتالن
Path	مسیر
Perfect matching	جورسازی کامل
Peri-condensed	سیستم پری کاندنس
Plane graph	گراف مسطح
Reflexive relation	روابط بازگشتی
Regular graph	گراف منتظم
Resonant	رزونانت
Resonant theory	تئوری رزونانت
Ring	حلقه
Sextet polynomial	چندجمله ای شش گانه
Spectrum	طیف
Sub chain	زیر زنجیر
Sub graph	زیر گراف

Symmetric matrix

ماتریس متقارن

Topological properties

خواص توپولوژیکی

Vertex degree

درجه رأسی

zigzag chain

زنجیر زیگ-زاگی

واژه نامه فارسی

Annelated L-mode	اتصال به فرم L
Annelated A-mode	اتصال به فرم A
Energy of graph	انرژی گراف
Laplacian energy of graph	انرژی لاپلاسیان گراف
Isomorphic	ایزومورف
Monotonous function	تابع یکنوا
Identifying	تلفیق
Resonant theory	تئوری رزونانت
Perfect matching	جورسازی کامل
Kekule structure	جورسازی کامل
Sextet polynomial	چندجمله ای شش گانه
Characteristic polynomial	چندجمله ای مشخصه
Ring	حلقه
Linear ring	حلقه خطی
Angular ring	حلقه گوشه ای
Empty	خالی
Topological properties	خواص توپولوژیکی
Vertex degree	درجه رأسی

Mutually resonant	دو به دو رزونانت
Cycle	دور
Induced cycle	دور القایی
Isolated vertex	رأس تنها
Interior vertex	رأس درونی
Resonant	رزونانت
Reflexive relation	روابط بازگشتی
Helicene chain	زنجیر حلقوی
Linear chain	زنجیر خطی
zigzag chain	زنجیر زیگ-زاگی
Hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی
M-tuple hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی ام-تایی
Double hexagonal chain	زنجیر شش ضلعی دوگانه
Fully angular polyhex chain	زنجیرهای شش ضلعی کاملاً گوشه ای
Sub chain	زیر زنجیر
Sub graph	زیر گراف
Benzenoid system	سیستم بنزنی
Peri-condensed	سیستم پری کاندنس
Hexagonal system	سیستم شش ضلعی
Cata-condensed	سیستم کاتاکاندنس
Branched	شاخه دار
Hexagonal spider	شش ضلعی عنکبوتی

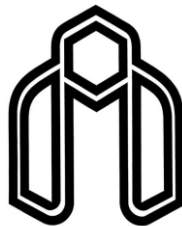
Spectrum	طیف
Code	کد
Double bounds	کران های دوگانه
Centeroid induced graph	گراف القایی مرکزی
Bipartite graph	گراف دوبخشی
Inner dual graph	گراف دوگان درونی
Plane graph	گراف مسطح
Regular graph	گراف منتظم
Connected graph	گراف همبند
Kekulean graph	گرافی با یک جورسازی کامل
Laplacian matrix	ماتریس لاپلاسین
Symmetric matrix	ماتریس متقارن
Adjacency matrix	ماتریس مجاورت
Complement	متمم
Alternate	متناوب
Circuit	مدار
Path	مسیر
Component	مؤلفه
Average vertex degree	میانگین درجه رأسی
Naphthalene	نفتالن
Co-spectral	هم- طیف
Conjugated hydrocarbons	هیدروکربن های جفت شده

Fixed edge	یال ثابت
Interior edge	یال درونی
Incident edge	یال مجاور
Double edges	یالهای دوگانه

Abstract

One of the special applications of graph theory in chemistry is energy of graph. Since the energy of a graph is the same as total π -electron energy of benzenoid structures, Therefore in this thesis has been tried to investigate the energy of these structures. For this purpose, we will define energy of graph and introduce it for benzenoid structures. But because of diversity of these systems, examination of all kinds of them is a complicated, but in this work it has been tried to investigate of each sample. These structures are divided to two clusters of c.c and p.c. So, from the first cluster we will investigate two kinds of branched and unbranch and we will represent a sequential relationship for each kind of them. From the second cluster, we will introduce only double hexagonal chains as a p.c system and as a generalization from section four; we will represent a sequential relationship for these systems. At the end, by regarding to the relationship of energy of graph, and since it is needed to calculation of eigenvalues and these calculations are very complicated and difficult for large graphs. In this collection it has been tried to reduce calculations as possible. For this case we will represent optimal methods for caculations of these values.

Key words: π -electron energy - benzenoid structures – double hexagonal chains- spider hexagonal systems.



Shahrood University of Technology

Faculty of Mathematic

Study of energy graph in structure of benzenoid hydrocarbons

Raheleh Sadat Mirkarimi

Supervisor:

Dr. Sadegh Rahimi Sharbaf

Jan 2010