دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

چند جمله‌ای‌های امگا و سادهانای

نانو ساختارها

تألیف:

دکتر مجتبی قربانی

دکتر سید علی‌رضا اشرفی

مریم جلالی

محمدعلی حسین‌زاده

عنوان و نام پدید آور	: چند جمله ای های امگا و سادهانای نانو ساختارها/ نویسندگان مجتبی قربانی..
مشخصات نشر	: تهران : دانشگاه شهید رجائی، ۱۳۸۸
مشخصات ظاهری	: ۱۷۰ ص .: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: 978-964-2651-53-5
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا.
موضوع	: مواد نانو ساختار
موضوع	: فولرن ها
موضوع	: چند جمله ای ها
شناسنامه افزوده	: قربانی، مجتبی، ۱۳۵۳-
شناسنامه افزوده	: دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی.
رده بندی کنگره	: ۹/TA ۴۱۸ /ن۲چ ۹ ۱۳۸۸
رده بندی دیویی	: ۶۲۰/۵
شماره کتابشناسی ملی	: ۱۹۹۴۳۳۲

دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

عنوان : چند جمله‌ای های امگا و سادهانای نانو ساختارها

تألیف : مجتبی قربانی، دکتر سید علی رضا اشرفی، مریم جلالی، محمد علی حسین زاده

چاپ اول : اسفند ۱۳۸۸

نوبت چاپ :دوم- پاییز ۱۳۹۳

انتشارات : دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

لیتوگرافی :فرانقش

چاپ مقدم

قیمت :۶۰۰۰تومان

شابک : ۵ – ۵۳ –۲۶۵۱ – ۹۶۴ – ۹۷۸ ISBN: 978 – 964 – 2651 – 53 – 5

نشانی: تهران، لویزان – کدپستی ۱۶۷۸۸ – صندوق پستی ۱۶۳ – ۱۶۷۸۵ – تلفن: ۹ – ۲۲۹۷۰۰۶۰

نمابر : ۲۲۹۷۰۰۰۳ پست الکترونیکی:sru@srttu.edu

چندجمله‌ای‌های امگا و ساده‌نای نانو ساختارها

نویسندگان:
دکتر مجتبی قربانی
(عضو هیات علمی دانشگاه شهید رجایی)
دکتر سید علی‌رضا اشرفی
(عضو هیات علمی دانشگاه کاشان)
مریم جلالی
محمد علی حسین‌زاده

فهرست مطالب

عنوان	صفحه

مقدمه

در بین همه عناصر کربن یک زندگی کامل اسـت. مهـم‌تـرین شـاخه شیمی، شیمی آلی به مطالعه پیوندهای کربن و مولکول‌هـای متفـاوت ساخته شده از آن‌ها اختـصاص دارد. کـربن بـه علـت ایـن‌کـه دارای ظرفیت چهار است قادر است تا زنجیرهای پایدار همـو – اتمیـک یـا شبکه‌های متفاوت چهار منظم ایجاد کنـد. دیگـر اتـم چهـار ظرفیتـی سیلیسیوم است که توسعه آن اخیرا آغاز شده است. بعـد از المـاس و گرافیت شبکه‌های لایه‌های کروی بسته، $C_{۶۰}$، در سـال ۱۹۸۵ توسـط کروتو، کرل و اسمالی سـنتز شـد. بـه اسـتثنای ایـن، ایـن سـاختارها خواص جالب توجه دیگری نیز دارند که به قرار زیر می‌باشد:

عناصری تقارنی دورانی از مرتبه پنج که در فضای کریستالوگرافیک یا گروه تقارنی صفحه نادیده انگاشته می‌شوند. به علاوه بـزرگ‌تـرین گروه تقارن نقطه‌ای ممکـن کـه همـان گـروه I_h مـی‌باشـد در ایـن ساختارها روی می‌دهد. بعد از $C_{۶۰}$ فولرین‌هـای دیگـری مثـل $C_{۷۶}$، $C_{۷۸}$، $C_{۸۲}$، $C_{۸۴}$ و ...ساخته شدند که حوزه جدیدی در تحقیقات باز کرده است. مهم‌ترین نظریات ریاضی مورد استفاده در این ساختارها، نظریه گروه، نظریه گراف و توپولوژی می‌باشد.

درون فولرین‌ها می‌توان برخی آنزیم‌ها و یا داروها و هورمـون‌هـای مورد نیاز بدن را قرار داد. به این ترتیب در نانو پزشـکی مـی‌تـوان از این مواد استفاده نمود. در این کتاب ضمن آشنایی با سه نوع سـاختار [۳,۶]، [۴,۶] و [۵,۶] فولرین‌ها بـه مطالعـه چندجملـه‌ای‌هـای امگـا،

سادهانا، تتا و پی که بررسی آن‌ها توسط نویسندگان این کتاب آغاز شده است، می‌پردازیم.

این کتاب دارای چهار فصل است. در فصل اول، مقدماتی از نظریه گراف و اعمال گراف آمده است. همچنین در این فصل به معرفی نانوساختارها می‌پردازیم. در فصل دوم، چندجمله‌ای‌های شمارشی امگا، سادهانا، تتا و پی را معرفی می‌کنیم. در این فصل همچنین با معرفی گراف‌های حاصل‌ضربی چندجمله‌ای‌های شمارشی آن‌ها را نیز محاسبه می‌کنیم. فصل سوم، به مثال‌های محاسباتی اختصاص دارد. بیشتر مطالب این فصل مربوط به مقالات نویسندگان این کتاب است. سرانجام در فصل چهارم برای چندین دسته از گراف‌ها ابتدا گراف لیپ فراگ را به دست می‌آوریم و سپس چندجمله‌ای‌های شمارشی آن‌ها را محاسبه می‌کنیم. در این فصل همچنین چندین عملگر جدید از گراف‌ها معرفی شده‌اند. امید است خوانندگان با مطالعه این کتاب، با مفاهیم نانومحاسبات آشنایی بیشتری کسب نموده و در صورت لغزش‌های احتمالی نویسندگان این کتاب را عفو نمایند.

قربانی/اشرفی/جلالی/حسین زاده

تهران — زمستان ۱۳۸۸

فصل اول

آشنایی با نظریه گراف

واژه گراف برای اولین بار توسط سیلوستر به کار گرفته شد. این مبحث را به این دلیل گراف می‌نامیم که می‌توان موضوع مورد بحث را به صورت گراف (نمودار) نمایش داد، و این نموداری است که به ما کمک می‌کند تا بسیاری از خواص آنها را درک کنیم. نظریه گراف از شاخه‌های نسبتا قدیمی ریاضی است که در بسیاری از مسائل مدرن امروزی کاربرد دارد. اولین بار لئونارد اویلر، ریاضیدان بزرگ سوییسی، در قرن هیجدهم میلادی برای حل معمای پل‌های کونیسبرگ از گراف استفاده کرد، اگر چه در متونی از شیمی، کاربردهایی قبل از اویلر ظاهر شده بود. نظریه گراف در آغاز چندان مورد توجه نبود، زیرا بیشتر برای حل معماها و تحلیل بازی‌ها به کار می‌رفت. اما از اواسط قرن نوزدهم ریاضی‌دانان متوجه شدند که

می‌توانند از گراف‌ها برای مدل‌سازی بسیاری از مسائل کاربردی استفاده کنند. امروزه از نظریه گراف در بسیاری از رشته‌ها مانند برق، شیمی، کامپیوتر، اقتصاد، ژنتیک و نیز در حل بسیاری از مسائل ریاضی کاربردی استفاده می‌کنند.

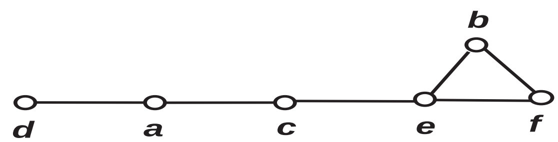
۱. ۱ مفاهیم مقدماتی نظریه گراف

یکی از شاخه‌های جدید علم ریاضی، ریاضی شیمی است که به دلیل اهمیت به سزای گراف در آن، این فصل را به بیان مقدماتی مفاهیم نظریه گراف اختصاص می‌دهیم. خواننده علاقه‌مند می‌تواند برای مطالعه بیشتر در این زمینه به مراجع [۱۳] و [۳۲] مراجعه کند.

تعریف ۱. ۱

یک گراف G یک دوتایی $(V(G),E(G))$ است که در آن $V(G)$ و $E(G)$ به ترتیب مجموعه راس‌ها و یال‌های G نامیده می‌شوند و هر عضو $E(G)$ زیرمجموعه‌ای دوعضوی از $V(G)$ است.

به عنوان مثال، فرض کنید مجموعه راس‌ها و یال‌های گراف G به ترتیب عبارتند از $V=\{a,b,c,d,e,f\}$ و $E=\{\{e,c\},\{b,f\},\{e,f\},\{a,c\},\{a,d\},\{b,e\}\}$. در این صورت نمودار گراف مورد نظر به صورت زیر است:



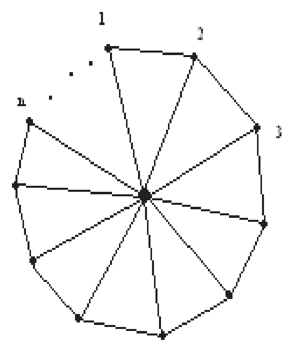
دو راس u و v از گراف G را مجاور می‌نامیم هرگـاه $\{u,v\} \in E(G)$ و از این به بعد $\{u,v\}$ را با uv نشان می‌دهیم. توجه کنید که زاویه بین یال‌ها و طول آن‌ها اهمیتی ندارد. یال با دو انتهای مجزا را پیونـد مـی‌نـامیم. بـه علاوه یک گراف، متناهی نامیده می‌شـود، هرگـاه مجموعـه راس‌هـای آن متناهی باشد. گراف $H=(V_1,E_1)$ زیرگراف $G=(V,E)$ نامیده می‌شـود، هرگاه V_1 زیرمجموعـه V و E_1 زیـرمجموعـه E باشـد. اگـر همـه جفـت راس‌های زیرگراف H که در G مجاورند در H نیز مجاور باشند، آن‌گاه H یک زیرگراف القایی نامیده می‌شود. به وضوح، یک زیرگراف القـایی از G به طور یکتا توسط مجموعه راس‌هایش تعیین می‌شود.

قرارداد. از نماد $|E(G)|$ و $|V(G)|$ به ترتیب برای نمایش تعـداد یـال‌هـا و راس‌های گراف G و از نماد $<S>$ بـرای یـک زیرگـراف G کـه توسـط $S \subseteq V(G)$ تولید شده است، استفاده می‌کنـیم. ایـن گـراف کـه در متـون نظریه گراف به زیرگراف القایی G توسـط S معـروف اسـت، S را بـه عنوان رئوس و تمامی یال‌های موجود در G بین این رئوس را به عنـوان یال‌های خود دارد. اگر راس v را از گراف G حذف کنیم زیرگرافی حاصل می‌شود که آن را با نماد $G-v$ نشان می‌دهیم. به طور مشابه، برای هر یال $e \in E(G)$ گراف $G-e$ از حذف یال e از مجموعه یال‌های G به دسـت می‌آید. همچنین درجه راس v از گراف G، برابر تعداد یال‌هایی اسـت کـه راس v بر آن‌ها واقع است و ما آن را با $\deg_G v$ نشان می‌دهیم. راس v را

یک راس تنها می‌نامیم هرگاه $\deg_G v = ۰$. همچنین گـراف G را نابـدیهی می‌نامیم هرگاه $|V(G)| > ۱$. زیرگراف H از G را زیرگراف فراگیر می‌نامیم هرگاه $V(H) = V(G)$.

تعریف ۲. ۱

گراف n راسی W_n که در آن یک راس دارای درجـه $n-۱$ و بـاقی رئوس از درجه ۳ باشند، یک چـرخ نامیـده مـی‌شـود، شـکل ۱. ۱ را ببینید.



شکل ۱ .۱: گراف چرخ.

گراف مولکولی، گرافی است که به یک مولکول نسبت داده می‌شود که در آن اتم‌ها معرف راس‌های گراف و پیونـدهای بـین اتـم‌هـا، معـرف یال‌های گراف هستند. یک گراف مولکولی را گاهی اوقات گراف شیمیایی نیز می‌نامیم.

قضیه ۳. ۱

جمع درجه راس‌های هر گراف، دو برابر تعداد یال‌های آن گراف است.

اثبات. فرض کنید G یک گراف باشد. در این صورت داریم:

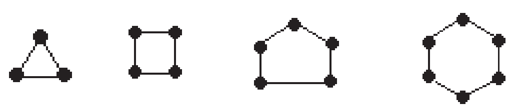
$$\sum_{u\in V(G)} \deg(u) = \sum_{u\in V(G)} \sum_{uv\in E(G)} ۱$$

هر یال از این جمع دوبار، یک بار برای v و یکی برای u در اولین سیگما محاسبه می‌شود. بنابراین $\sum_{u\in V(G)} \deg(u) = ۲|E(G)|$.

تعریف ٤. ۱

فرض کنیم $n \geq ۳$، $V = \{v_۱, v_۲, ..., v_n\}$ و $E = \{v_۱v_۲, v_۲v_۳, ..., v_{n-۱}v_n, v_nv_۱\}$. در این صورت گراف $G = (V, E)$ را دور n رأسی می‌نامیم و آن را با C_n نشان می‌دهیم.

می‌توان نمودار C_n را یک n ضلعی در نظر گرفت (شکل۲. ۱ را ببینید).



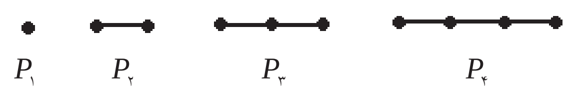
C_3 C_4 C_5 C_6

شکل۲. ۱: گراف دور C_n برای $n = ۳,۴,۵,۶$.

تعریف ۵. ۱

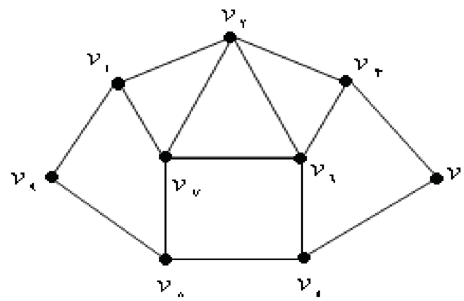
فرض کنیم $V=\{v_1,v_2,\dots,v_n\}$ و $E=\{v_1v_2,v_2v_3,\dots,v_{n-1}v_n\}$ $\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$. در این صورت گراف $G=(V,E)$ را مسیر n رأسی می‌نامیم و آن را با P_n نشان می‌دهیم.

نمودار P_n به ازای $n=۱,۲,۳,۴$ در شکل ۳. ۱ رسم شده است.



شکل۳. ۱: گراف مسیر P_n برای $n=۱,۲,۳,۴$.

فرض کنید گراف شکل ۴. ۱ نقشه شهرهای یک کشور باشد. رأس‌ها نماینده شهرهای این کشور و یال‌ها نماینده جاده‌های بین این شهرها هستند. برای مسافرت از شهر v_1 به v_4 راه‌های مختلفی وجود دارد. یکی از این راه‌ها عبور از شهرهای v_2، v_7، v_6، v_5 و رسیدن به v_4 است. حال مسأله رفت و آمد بین شهرها از طریق جاده‌ها را به زبان نظریه گراف، بررسی می‌کنیم. برای این منظور، مفاهیم گشت، گذر و مسیر را در گراف تعریف و در ادامه گراف‌های همبند را معرفی می‌کنیم. سرانجام فاصله بین دو رأس از گراف و قطر گراف را نیز تعریف می‌کنیم.



شکل۴. ۱: گراف شهرهای مختلف.

تعریف ٦. ١

فرض کنیم G یک گراف و u و v دو رأس از G باشند. منظـور از گشـــت بـــین u و v در G، دنبالـــه‌ای از رأس‌هـــای G، ماننـــد $u=x_0,x_1,x_2,\ldots,x_{k-1},x_k=v$ است به طوری که برای هر $i=1,2,\ldots,k$، $x_{i-1}x_i$ها یال هستند.

تعداد یال‌های طی شده در گشت را طول گشـت مـی‌نـامیم. طـول گشت بالا برابر k است. گذر بین u و v، گشتی بین u و v است کـه یال تکراری نداشته باشد و مسیر بین u و v، گشتی بـین u و v اسـت که رأس تکراری نداشته باشد. همچنین دنباله تک جمله‌ای u را مسـیری به طول صفر در نظر مـی‌گیـریم. فـرض کنیـد l عـددی طبیعـی باشـد و $l \geq 3$. در این صورت منظور از دوری به طول l در گراف G، گشتی به طول l مانند $x_1,x_2,\ldots,x_l,x_1$ است بـه طـوری کـه x_1، x_2، ... و x_l متمایز باشند.

مثال ۱ .۷

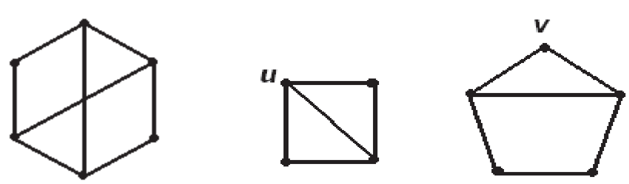
گــــراف شـــــکل ۴. ۱ را در نظــــر بگیریـــــد. در ایــــن صــــورت $v_9,v_8,v_7,v_1,v_2,v_7,v_6,v_5,v_8,v_7,v_2$ گشتی بـه طـول ۱۰ بـین v_9 و v_2، همچنین $v_9,v_1,v_7,v_6,v_5,v_4,v_3,v_6,v_2,v_1$ گذری بـه طـول ۹ بـین v_9 و v_2 و مسیری به طول ۵ بـه صـورت v_8,v_9,v_1,v_7,v_6,v_3 بـین v_8 و v_3 موجود است.

تعریف ۱ .۸

گراف G را همبند می‌نامیم، هرگاه بین هر دو رأس آن مسیری وجـود داشته باشد. در غیر این صورت G را ناهمبند می‌نامیم.

مثال ۱ .۹

گراف شکل ۵. ۱ الف، همبند و گراف شـکل ۵. ۱ ب، ناهمبنـد اسـت. زیرا به طور مثال بـین دو رأس u و v در ایـن گـراف، هـیچ مسـیری وجود ندارد.



الف　　　　ب

شکل ۵. ۱: گراف‌های همبند (الف) و ناهمبند(ب).

قضیه ۱.۱۰

اگر در گراف G، گشتی بین دو رأس u و v وجود داشته باشد، آن‌گاه مسیری بین u و v در G وجود دارد.

اثبات. فرض کنیم در میان گشت‌های موجود بین u و v، $P: u=x_0,x_1,x_2,...,x_{k-1},x_k=v$ گشتی با کوچکترین طول باشد (P وجود دارد اما ممکن است منحصربه فرد نباشد). اگر P مسیر نباشد، آن‌گاه اندیس‌هایی مانند i و j وجود دارند به طوری که $i<j$ و $x_i=x_j$. در این صورت $Q: u=x_0,x_1,x_2,...,x_i,x_{j+1},...,x_{k-1},x_k=v$ گشتی بین دو رأس u و v است به طوری که طول آن از طول Q کوچکتر است و این با تعریف P تناقض دارد. در نتیجه P یک مسیر است و حکم ثابت می‌شود.

تعریف ۱.۱۱

فرض کنیم A و B دو مجموعه باشند، حاصل‌ضرب دکارتی $A\times B$ مجموعه جفت‌های مرتب (a,b) است که در آن $a\in A$ و $b\in B$. به عبارت دیگر $A\times B=\{(a,b)\mid a\in A, b\in B\}$. هر رابطه چون R از A به B، زیر مجموعه‌ای از حاصل‌ضرب دکارتی $A\times B$ است. اگر $(a,b)\in R$ گوییم که a با b در رابطه است و با aRb نمایش می‌دهیم. هر زیر مجموعه $A\times A$ را یک رابطه R در A می‌نامیم. حال رابطه R در A را در نظر بگیرید. در این صورت می‌گوییم:

الف) R خاصیت انعکاسی یا بازتابی دارد هرگاه برای هر $a\in A$، aRa،

ب) R خاصیت تقارنی دارد هرگاه برای هر $a,b\in A$ ، اگر aRb آن‌گاه bRa ،

ج) R خاصیت تعدی یا ترایایی دارد هرگاه برای هر $a,b,c\in A$، اگر aRb و bRc آن‌گاه aRc.

رابطه‌ای که دارای خواص انعکاسی و تقارنی و تعدی باشد، یک رابطه هم‌ارزی نامیده می‌شود. اگر R یک رابطه هم‌ارزی روی مجموعه A و $a\in A$، آن‌گاه، مجموعه اعضایی از A که با a در رابطه‌اند را با $[a]$ یا $Cl(a)$ نشان می‌دهیم و کلاس هم‌ارزی شامل a گوییم و داریم:

$$[a]=\{x\in A \mid aRx\} .$$

مثال ۱.۱۲

فرض کنیم $A=\{۱,۲,۳,۴,۵\}$. در این صورت رابطه

$$R=\{(۱,۱),(۲,۲),(۳,۳),(۴,۴),(۵,۵),(۱,۲),(۲,۱)\}$$

یک رابطه هم‌ارزی روی A است و کلاس‌های آن به صورت زیر می‌باشند:

$$[۱]=\{۱,۲\},[۳]=\{۳\},[۴]=\{۴\},[۵]=\{۵\}.$$

قضیه ۱.۱۳

فرض کنید G یک گراف و u و v دو رأس از G باشند. در این صورت اگر بین u و v مسیری در G وجود داشته باشد، می‌نویسیم $u\sqcup v$. در این حالت $\sqcup$ رابطه‌ای هم‌ارزی روی V است.

اثبات. ابتدا به ازای هر رأس مانند u، یک مسیر به طول صفر بین u و