



بررسی شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور در ساختارهای نانولوله‌های تیتانیا

فاطمه سادات موحدی^{۱*} و محمد هادی اخباری^۲

^۱ گروه ریاضی، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

^۲ گروه ریاضی، واحد استهبان، دانشگاه آزاد اسلام، استهبان، ایرا

چکیده: در مدل‌های رابطه کمی ساختار-ویژگی (QSPR)، تکنیک‌های نظریه گراف برای کشف ارتباط بین خواص فیزیکی-شیمیایی ترکیبات شیمیایی و خواص ساختار مولکولی آنها استفاده می‌شود. شاخص‌های توپولوژیکی به عنوان ابزار ارزشمندی برای پیش‌بینی خواص ترکیبات شیمیایی و برای توسعه مطالعات QSPR استفاده می‌شوند. نانولوله‌های تیتانیا نقش مهمی در علم مواد دارند و کاربردهای عملی در مواد کاتالیزوری، حسگرهای گاز، دستگاه‌های زیست پزشکی و سلول‌های خورشیدی پیدا می‌کنند. در این مقاله، شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور در یک کلاس نامتناهی از نانولوله‌های تیتانیا با استفاده از روش افراز یال در مدل‌سازی نظریه گراف محاسبه شد. نتایج در این مطالعه نشان می‌دهد که در بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور، شاخص تغییر یافته سمبور و شاخص بیضوی سمبور به ترتیب کمترین و بیشترین مقدار را برای گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا دارا می‌باشند. همچنین، در بین شاخص‌های ضربی سمبور در ساختار نانولوله‌های تیتانیا، کمترین و بیشترین مقدار به ترتیب مربوط به شاخص ضربی تغییر یافته سمبور و شاخص ضربی افزایش یافته سمبور می‌باشد. به علاوه، با استفاده از مدل‌سازی QSPR، قدرت پیش‌بینی شاخص‌های نوع سمبور برای خواص فیزیکی-شیمیایی هیدروکربن‌های بنزوئیدی با استفاده از مدل رگرسیون خطی بررسی شد. نتایج در این مطالعه نشان می‌دهد که شاخص معکوس سمبور بهترین شاخص برای پیش‌بینی نقطه جوش، آنتالپی تبخیر، نقطه اشتعال و حجم مولی است، در حالی که شاخص افزایش یافته سمبور بهترین پیش‌بینی کننده برای شکست مولی و قطبش پذیری مولکول‌های هیدروکربن‌های بنزوئیدی می‌باشد. نتایج در این مقاله، بینش‌های ارزشمندی را در مورد ویژگی‌های ساختار نانولوله‌های تیتانیا ارائه می‌دهد و به پیشرفت شاخص‌های توپولوژیکی برای پیش‌بینی رفتار سایر ترکیبات شیمیایی کمک می‌کند.

واژگان کلیدی: شاخص توپولوژیکی، شاخص سمبور، شاخص ضربی سمبور، مدل‌سازی QSPR، نانولوله تیتانیا.

*f.movahedi@gu.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۴/۲۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۶/۱۱

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۶/۱۸

پاییز ۱۴۰۳ | شماره ۳ | سال یازدهم

شیمی ریاضی با استفاده از ابزارهای ریاضی به بررسی و پیش‌بینی خواص شیمیایی مولکول‌ها با توجه به ساختار آن‌ها می‌پردازد. این شاخه از ریاضیات، نظریه گراف را با شیمی ترکیب کرده تا پدیده‌های شیمیایی را به صورت ریاضی مدل کند. در این مطالعات، یک مولکول شیمیایی به صورت یک گراف ساده به نام گراف مولکولی مدل می‌شود به طوری که راس‌ها، اتم‌های مولکول و یال‌ها در گراف مولکولی پیوند شیمیایی بین اتم‌ها است [۱]. شاخص توپولوژیکی یک مقدار عددی است که بر اساس گراف مولکولی از یک پدیده شیمیایی محاسبه می‌شود [۲]. شاخص‌های توپولوژیکی برای همبستگی ساختار یک مولکول با خواص فیزیکی-شیمیایی، بیولوژیکی و فارماکولوژیکی مختلف در مطالعات کمی ساختار-ویژگی (QSPR) مفید هستند [۳، ۴]. با تجزیه و تحلیل این شاخص‌ها در مدل QSPR، محققان می‌توانند خواص فیزیکی-شیمیایی از ترکیبات شیمیایی جدید را پیش‌بینی کنند. برای اطلاعات بیشتر از شاخص‌های توپولوژیکی و کاربردهای آنها می‌توان به [۵-۷] مراجعه کرد.

نانولوله‌های تیتانیا (TiO_2) طی دو دهه‌ی اخیر با استفاده از روش‌های مختلف سنتز شدند و به‌عنوان مواد فناوری آینده‌نگر به‌دقت مورد مطالعه قرار گرفتند. تیتانیا به‌عنوان یک نیمه هادی با کاربردهای تکنولوژیکی متعدد، به‌طور جامع در علم مواد مورد مطالعه قرار گرفته است. از آنجایی که مکانیسم رشد نانولوله‌های TiO_2 هنوز به خوبی تعریف نشده است، مطالعات نظری آنها به شدت مورد توجه محقق قرار گرفته است. ورقه‌های TiO_2 با ضخامت چند لایه اتمی به‌طور قابل ملاحظه‌ای پایدار هستند [۸]. نانولوله‌های تیتانیا ترکیباتی هستند که در زمینه‌های مختلف فناوری مانند پزشکی، انرژی و زیست‌حسگر پدید آمده‌اند. سودا و همکاران در [۹] گزارش کردند که نانولوله‌های تیتانیا می‌توانند با داروهای متنوعی مانند آنتی‌بیوتیک‌ها، داروهای پوکی استخوان و ضد سرطان واکنش نشان دهند. نانولوله‌های TiO_2 با مولکول‌های شیمیایی پایه واکنش داده و با آن پلیمری ساخته که به‌عنوان یک عامل دارورسانی عمل می‌کنند. همچنین این ساختارهای شیمیایی و مشتقات آن در غلبه بر میکرو ارگانیزم‌های بیماری‌زای انسانی بسیار مفید می‌باشند. علاوه بر آن، TiO_2 کاربردهای گسترده‌ای

در ایمپلنت‌های پزشکی، آنتی‌باکتریال، دارورسانی و نانو زیست‌حسگرها دارند. از نانوذرات TiO_2 می‌توان برای پاکسازی آب آلوده استفاده کرد. آنها بر فیزیولوژی گیاه به‌ویژه تحت تنش‌های غیرزیستی تأثیر مثبت گذاشته است [۱۰].

توپولوژی ساختار یک مولکول نقش مهمی در درک خواص فیزیکی-شیمیایی یک ترکیب شیمیایی مانند نقطه جوش، نقطه ذوب، آنتروپی، قطبش‌پذیری، ظرفیت و غیره ایفا می‌کند [۲].

مطالعات بسیاری برای بررسی ساختارهای شیمیایی با استفاده از شاخص‌های توپولوژیکی صورت گرفته است. مالک [۱۱] برخی شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر فاصله و درجه را برای حاصل ضرب گراف محاسبه کرد. در مطالعه‌ی دیگر، او و ایمران [۱۲] شاخص ضربی زاگرب را برای ساختارهای نانولوله تیتانیا محاسبه کردند. موندال و همکاران [۱۳] با استفاده از M -چندجمله‌ای همسایگی به مطالعه ساختار نانولوله‌های تیتانیا پرداخته و برخی شاخص‌های توپولوژیکی همسایگی از این ساختارها را محاسبه کردند. در [۱۴، ۱۵]، به ترتیب شاخص‌های توپولوژیکی ریوان و هایپر ریوان و بانهاتی و هایپر باهاتی برای گراف مولکولی و گراف خطی از نانولوله‌های تیتانیا محاسبه گردید. رحیم و همکاران [۱۶] برخی شاخص‌های مبتنی بر درجه برای ساختار نانولوله‌های تیتانیا را با استفاده از M -چندجمله‌ای محاسبه کردند. همچنین در مطالعه‌ای مشابه جاوید و همکاران [۱۷] برخی شاخص‌های توپولوژیکی مانند شاخص ضربی زاگرب، شاخص زاگرب توسعه‌یافته، نسخه چهارم شاخص همبندی اتم-پیوند و نسخه پنجم شاخص هندسی-حسابی برای نانولوله تیتانیا محاسبه کردند. برای مطالعات بیشتر در زمینه بررسی شاخص‌های توپولوژیکی بر ساختارهای نانو و داروها می‌توان به [۱۸-۲۵] اشاره کرد.

در این مقاله به منظور مطالعه و بررسی ساختارهای نانولوله‌های تیتانیا، برخی شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور را محاسبه می‌کنیم. همچنین با معرفی نسخه ضربی از این شاخص‌ها، فرمول‌های دقیقی از آنها در گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا بدست می‌آوریم. برای ارزیابی همبستگی بین شاخص‌های نوع سمبور و خواص فیزیکی-شیمیایی مولکول‌ها، با در نظر گرفتن ساختارهای هیدروکربن‌های بنزوئیدی یک مدل QSPR ایجاد می‌کنیم.

۲- مدل سازی نانولوله تیتانیا TiO_2

سیلیکات و گرافن این شاخص را محاسبه کرد. شاخص تغییر یافته سمبور به صورت زیر تعریف می شود.

$$MSO(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}}$$

سوامی و همکاران در [۲۸] شاخص معکوس سمبور را به صورت زیر تعریف کردند.

$$SO_{rev}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{(\Delta - d(u) + 1)^2 + (\Delta - d(v) + 1)^2}$$

داس و همکاران [۲۹] شاخص افزایش یافته سمبور را به صورت زیر معرفی کردند.

$$SO^1(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u) + 1)^2 + (d(v) + 1)^2}$$

اخیراً، گوتمن و همکاران [۳۰] در سال ۲۰۲۴ یک روش هندسی جدید برای ساخت شاخص های توپولوژیکی مبتنی بر درجه راس بر اساس یک بیضی ارائه کردند که نقاط کانونی آن نشان دهنده درجات یک جفت رئوس مجاور است. بر اساس این روش، دو شاخص توپولوژیکی، یعنی شاخص بیضوی سمبور (ESO) [۳۰] و شاخص سمبور اویلر (EU) [۳۱] به شرح زیر تعریف می شوند.

$$ESO(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v)) \sqrt{d^2(u) + d^2(v)}$$

$$EU(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2 + d(u)d(v)}$$

در [۳۰]، نویسندگان برخی از خواص ریاضی و کاربردهای شاخص بیضوی سمبور را بررسی کردند. تانگ و همکاران [۳۱] کاربرد شیمیایی شاخص سمبور اویلر را تجزیه و تحلیل کردند. در [۳۲] کاربرد شاخص های خانواده سمبور مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج از این مطالعه نشان می دهد که این شاخص ها می توانند با موفقیت برای مدل سازی خواص ترمودینامیکی ترکیبات شیمیایی به کار گرفته شوند. لیو و همکاران در [۳۳] گزارش کردند که همبستگی قوی بین نقاط جوش و شاخص های نوع سمبور برخی از ترکیبات شیمیایی مانند هیدروکربن های بنزنوئیدی وجود دارد. آنها نشان دادند که شاخص RSO می تواند برخی از خواص فیزیکی-شیمیایی از جمله عوامل غیرمرکزی، $SNar$ ، $HNar$ و آنتروپی را پیش بینی کند. دنگ و همکاران [۳۴] اهمیت شیمیایی

در این بخش، به بررسی ساختار نانولوله های تیتانیا پرداخته و با استفاده از مدل سازی گراف و روش افراز یال ها در گراف، شاخص های توپولوژیکی نوع سمبور را برای این ساختارها محاسبه می کنیم. در ابتدا به بیان برخی مفاهیم در نظریه گراف شیمیایی مورد نیاز در این مطالعه، می پردازیم. فرض کنید $G = (V, E)$ یک گراف ساده با مجموعه رئوس V و مجموعه یال E باشد. یادآوری می کنیم که منظور از یک گراف ساده، گراف بدون یال های چندگانه و طوقه می باشد. بنابراین، در یک گراف مولکولی G ، با در نظر گرفتن اتم ها در مجموعه V ، پیوند بین اتم ها را یال نامیده و از بین پیوندهای بین دو اتم، تنها یکی از آنها را در نظر می گیریم. $|E|$ و $|V|$ به ترتیب، مرتبه و اندازه گراف G نامیده می شود. برای دو راس u و v در گراف G ، منظور از نماد $u \sim v$ ، مجاورت این دو راس می باشد و بدان معنا است که بین این دو راس یک یال وجود دارد. به تعداد راس های مجاور با راس u ، درجه راس u گویند و با نماد $d(u)$ نشان می دهند. بزرگترین و کوچکترین درجه از رئوس در گراف G را به ترتیب، با نماد Δ و δ نشان می دهند.

۲-۱- شاخص های توپولوژیکی نوع سمبور

گوتمن در سال ۲۰۲۱ [۲۶]، خانواده جدیدی از شاخص های توپولوژیکی مبتنی بر درجه با عنوان شاخص های سمبور معرفی کرد. این شاخص های عبارتند از شاخص سمبور (SO) و شاخص کاهش یافته سمبور (RSO) که به صورت زیر تعریف می شوند.

$$SO(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}$$

۹

$$RSO(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u) - 1)^2 + (d(v) - 1)^2}$$

مبتنی بر تعریف شاخص های توپولوژیکی شناخته شده تاکنون و شاخص سمبور، شاخص های توپولوژیکی مختلفی از یک گراف ارائه شده است. کولی در [۲۷] شاخص تغییر یافته سمبور (MSO) را معرفی و برای برخی ساختارهای شیمیایی مانند شبکه های

$$\begin{aligned} \Pi_{MSO}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}}, \\ \Pi_{SO_{rev}}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(\Delta - d(u) + 1)^2 + (\Delta - d(v) + 1)^2}, \\ \Pi_{SO^1}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u) + 1)^2 + (d(v) + 1)^2}, \\ \Pi_{ESO}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v)) \sqrt{d^2(u) + d^2(v)}, \\ \Pi_{EU}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2 + d(u)d(v)}. \end{aligned}$$

۲-۲- نتایج اصلی

در این بخش، ساختار گراف مولکولی نانولوله تیتانیا را بررسی می‌کنیم. سپس با استفاده از روش افزایش یال برحسب درجه رئوس، شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و نسخه ضربی آنها را که در بخش ۱-۲ بیان شده است، محاسبه می‌کنیم.

شکل ۱ ساختار مولکولی از نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ را نشان می‌دهد که در آن m نشان دهنده‌ی تعداد هشت ضلعی در یک سطر و n نشان دهنده‌ی تعداد هشت ضلعی در ستون از نانولوله تیتانیا می‌باشد. برای مثال، ساختار مولکولی $TiO_2[5, 4]$ در شکل ۲ نشان داده شده است. فرض کنید G گراف مولکولی نانولوله تیتانیا $TiO_2[m, n]$ باشد. بر اساس ساختار گراف $TiO_2[m, n]$ مجموعه رئوس این گراف برحسب درجه رئوس، به صورت زیر افزایش می‌شود.

$$\begin{aligned} V_2 &= \{u \in V(G) : d(u) = 2\}, & |V_2| &= 2mn + 4n, \\ V_3 &= \{u \in V(G) : d(u) = 3\}, & |V_3| &= 2mn, \\ V_4 &= \{u \in V(G) : d(u) = 4\}, & |V_4| &= 2n, \\ V_5 &= \{u \in V(G) : d(u) = 5\}, & |V_5| &= 2mn. \end{aligned}$$

بنابراین، داریم $V(G) = \cup_{2 \leq i \leq 5} V_i$ و تعداد رئوس در این گراف برابر است با $|V(G)| = \sum_{2 \leq i \leq 5} |V_i| = 6nm + 6n$.

شاخص SO را بررسی کردند و نشان دادند که این شاخص در مقایسه با برخی از شاخص‌های شناخته شده از دقت بالایی برای پیش‌بینی خواص فیزیکی-شیمیایی برخوردار است. لیو و همکاران [۳۵] نشان داد که شاخص سمبور کاهش یافته قدرت پیش‌بینی بهتری در مقایسه با برخی از شاخص‌های شناخته شده از جمله شاخص فراموش شده، شاخص‌های زاگرب و شاخص راندیک دارد. موحدی و اخباری [۳۶] ساختار گراف مولکولی اسید هیالورونیک مزدوج با متوترکسات را با محاسبه فرمول‌های دقیق برخی از شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور مورد مطالعه قرار دادند. در [۳۷] سمیعی و موحدی ساختار مولکولی داروهای ضد ویروسی، ریتوناویر و لوپیناویر را با استفاده از نظریه گراف و رویکرد افزایش یال بررسی کردند. آنها فرمول‌های دقیقی برای برخی از شاخص‌های توپولوژیکی و شاخص‌های اندیس‌دار نوع سمبور از گراف مولکولی و گراف خطی ساختارهای شیمیایی این داروهای ضد ویروسی را تعیین کردند و با استفاده از روش رگرسیون خطی در مدل QSPR، به بررسی روابط بین این شاخص‌ها و خواص فیزیکی-شیمیایی داروهای ضد ویروسی پرداختند. در [۳۸]، شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر درجه با معرفی شاخص‌های توپولوژیکی ضربی به صورت زیر گسترش یافتند.

$$\Pi_{TI}(G) = \prod_{uv \in E(G)} F(d(u), d(v)).$$

از اینکه محاسبه شاخص‌های توپولوژیکی ضربی در یک گراف و کاربردهای آنها مورد توجه محقق قرار گرفته است، چندین شاخص ضربی سمبور از جمله شاخص ضربی سمبور (Π_{SO}) [۳۹]،

$$\Pi_{SO}(G) = \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2},$$

و شاخص ضربی کاهش یافته سمبور [۴۰]،

$$\Pi_{RSO}(G) = \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u) - 1)^2 + (d(v) - 1)^2},$$

معرفی و بررسی شده است.

با توجه به تعاریف فوق، نسخه ضربی از شاخص‌های تغییر یافته سمبور، معکوس سمبور، افزایش یافته سمبور، بیضوی سمبور و سمبور اوپلر به ترتیب، به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

در قضیه زیر، شاخص‌های نوع سمبور بیان شده در بخش ۱-۲ را برای گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ بدست می‌آوریم.

قضیه ۱. فرض کنید G گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ باشد. در این صورت

$$SO(G) = 2n(5 + 6\sqrt{5} + \sqrt{29} - \sqrt{34}) + (4\sqrt{29} + 6\sqrt{34})mn \quad (۱)$$

$$RSO(G) = 2n(3\sqrt{10} + \sqrt{13} + \sqrt{17} - 2\sqrt{5}) + (12\sqrt{5} + 4\sqrt{17})mn \quad (۲)$$

$$MSO(G) = \left(\frac{2}{5} - \sqrt{\frac{2}{17} + \frac{3}{5} + \frac{2}{\sqrt{29}}}\right)n + \left(3\sqrt{\frac{2}{17} + \frac{4}{\sqrt{29}}}\right)mn \quad (۳)$$

$$SO_{rev} = 2n(6\sqrt{5} + \sqrt{13} + \sqrt{17} - \sqrt{10}) + (6\sqrt{10} + 4\sqrt{17})mn \quad (۴)$$

$$SO^1(G) = 2(3\sqrt{5} + 3\sqrt{34} + \sqrt{41} - 2\sqrt{13})n + 12(\sqrt{5} + \sqrt{13})mn \quad (۵)$$

$$ES(G) = 2(35 + 36\sqrt{5} + 7\sqrt{29} - 8\sqrt{34})n + 2(14\sqrt{29} + 24\sqrt{34})mn \quad (۶)$$

$$EU(G) = 2(6\sqrt{7} + \sqrt{27} + \sqrt{29} - 7)n + 2(21 + 2\sqrt{39})mn \quad (۷)$$

اثبات. با استفاده از جدول ۱ و تعاریف شاخص‌های سمبور نتایج به صورت زیر محاسبه می‌شود.

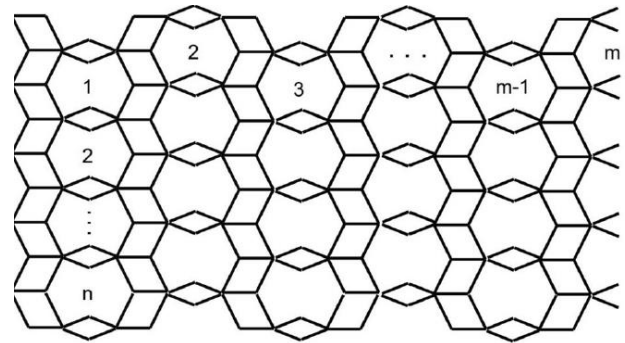
(۱)

$$\begin{aligned} SO(G) &= \sum_{uv \in E} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\ &= \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} + \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\ &+ \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} + \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\ &= |E_{24}| \sqrt{(2)^2 + (4)^2} + |E_{25}| \sqrt{(2)^2 + (5)^2} \\ &+ |E_{34}| \sqrt{(3)^2 + (4)^2} + |E_{35}| \sqrt{(3)^2 + (5)^2} \\ &= 6n\sqrt{20} + (4nm + 2n)\sqrt{29} + 2n\sqrt{25} + (6nm - 2n)\sqrt{34} \\ &= 2n(5 + 6\sqrt{5} + \sqrt{29} - \sqrt{34}) + (4\sqrt{29} + 6\sqrt{34})mn. \end{aligned}$$

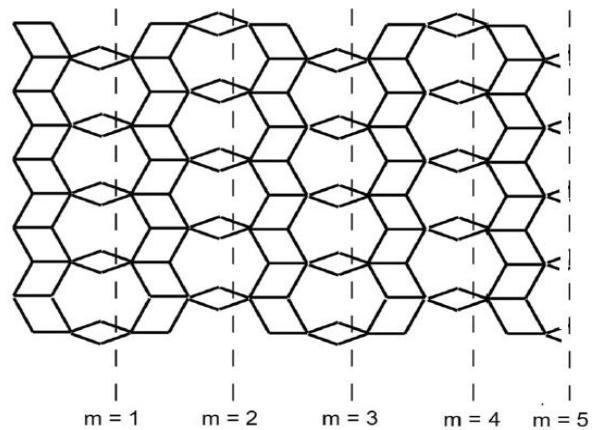
(۲)

$$\begin{aligned} RSO(G) &= \sum_{uv \in E} \sqrt{(d(u) - 1)^2 + (d(v) - 1)^2} \\ &= \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{(1)^2 + (3)^2} + \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{(1)^2 + (4)^2} \\ &+ \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{(2)^2 + (3)^2} + \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{(2)^2 + (4)^2} \\ &= |E_{24}| \sqrt{10} + |E_{25}| \sqrt{17} + |E_{34}| \sqrt{13} + |E_{35}| \sqrt{20} \\ &= 2n(3\sqrt{10} + \sqrt{13} + \sqrt{17} - 2\sqrt{5}) + (12\sqrt{5} + 4\sqrt{17})mn. \end{aligned}$$

(۳)



شکل ۱: گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$



شکل ۲: گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[5, 4]$

همچنین با توجه به درجه رئوس در گراف G ، مجموعه یال در گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ به صورت زیرمجموعه‌های زیر افراز می‌شود.

$$E_{24} = \{uv \in E(G) : d(u) = 2, d(v) = 4\},$$

$$E_{25} = \{uv \in E(G) : d(u) = 2, d(v) = 5\},$$

$$E_{34} = \{uv \in E(G) : d(u) = 3, d(v) = 4\},$$

$$E_{35} = \{uv \in E(G) : d(u) = 3, d(v) = 5\}.$$

در جدول ۱، تعداد یال‌های زیرمجموعه‌های E_{ij} را مشخص شده است. بنابراین، داریم $E(G) = \bigcup_{2 \leq i \leq 5} E_i$ و تعداد رئوس در این گراف برابر است با

$$|E(G)| = \sum_{2 \leq i \leq 5} |E_{ij}| = 10nm + 8n$$

جدول ۱: افراز از مجموعه یال‌ها در گراف مولکولی نانولوله تیتانیا.

E_{24}	E_{25}	E_{34}	E_{35}	زیرمجموعه‌های افراز یالی
$6n$	$2n(2m + 1)$	$2n$	$2n(3m - 1)$	تعداد یال‌ها

$$\begin{aligned}
 EU(G) &= \sum_{uv \in E} \sqrt{d^2(u) + d^2(v) + d(u)d(v)} \\
 &= \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{(2)^2 + (4)^2 + 8} + \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{(2)^2 + (5)^2 + 10} \\
 &+ \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{(3)^2 + (4)^2 + 12} + \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{(3)^2 + (5)^2 + 15} \\
 &= |E_{24}| \sqrt{28} + |E_{25}| \sqrt{39} + |E_{34}| \sqrt{37} + |E_{35}| \sqrt{45} \\
 &= 2(6\sqrt{7} + \sqrt{27} + \sqrt{29} - 7)n + 2(21 + 2\sqrt{39})mn.
 \end{aligned}$$

در قضیه زیر، شاخص‌های ضربی نوع سمبور تعریف شده در بخش ۱-۲ را برای گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ بدست می‌آوریم.

قضیه ۱. فرض کنید G گراف مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ باشد. در این صورت

$$\begin{aligned}
 \Pi_{SO}(G) &= 2^{(3mn+5)} \times 5^{5n} \times 17^{(3mn-n)} \times 29^{(2mn+n)} \quad (۱) \\
 \Pi_{RSO}(G) &= 2^{(6mn+n)} \times 5^{(3mn+2n)} \times 13^n \times 17^{(2mn+n)} \quad (۲) \\
 \Pi_{MSO}(G) &= \left(\frac{1}{2}\right)^{(3mn+5)} \times \left(\frac{1}{5}\right)^{5n} \times \left(\frac{1}{17}\right)^{(3mn-n)} \times \left(\frac{1}{29}\right)^{(2mn+n)} \quad (۳) \\
 \Pi_{SO_{rev}}(G) &= 2^{(3mn+5n)} \times 5^{(3mn+2n)} \times 13^n \times 17^{(2mn+n)} \quad (۴) \\
 \Pi_{SO^1}(G) &= 2^{(6mn+n)} \times 13^{(3mn-n)} \times 45^{(2mn+n)} \times 201433^n \quad (۵) \\
 \Pi_{ESO}(G) &= 1472^{(3mn+5n+4)} \times 5^{5n} \times 17^{(3mn-n)} \times 29^{(2mn+n)} \quad (۶) \\
 \Pi_{EU}(G) &= 7^{(6mn+n)} \times 39^{(2mn+n)} \times 2368^n \quad (۷)
 \end{aligned}$$

اثبات. با استفاده از جدول ۱ و تعاریف شاخص‌های ضربی نوع سمبور، داریم

$$\begin{aligned}
 \Pi_{SO}(G) &= \prod_{uv \in E} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\
 &= \prod_{uv \in E_{24}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \times \prod_{uv \in E_{25}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\
 &\times \prod_{uv \in E_{34}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \times \prod_{uv \in E_{35}} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2} \\
 &= \prod_{uv \in E_{24}} \sqrt{20} \times \prod_{uv \in E_{25}} \sqrt{29} \times \prod_{uv \in E_{34}} \sqrt{25} \times \prod_{uv \in E_{35}} \sqrt{34} \\
 &= (2\sqrt{5})^{|E_{24}|} \times (\sqrt{29})^{|E_{34}|} \times (5)^{|E_{25}|} \times (\sqrt{34})^{|E_{35}|} \\
 &= 2^{(3mn+5)} \times 5^{5n} \times 17^{(3mn-n)} \times 29^{(2mn+n)}.
 \end{aligned}$$

(۷)

$$\begin{aligned}
 MSO(G) &= \sum_{uv \in E} \frac{1}{\sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}} \\
 &= \sum_{uv \in E_{24}} \frac{1}{\sqrt{(2)^2 + (4)^2}} + \sum_{uv \in E_{25}} \frac{1}{\sqrt{(2)^2 + (5)^2}} \\
 &+ \sum_{uv \in E_{34}} \frac{1}{\sqrt{(3)^2 + (4)^2}} + \sum_{uv \in E_{35}} \frac{1}{\sqrt{(3)^2 + (5)^2}} \\
 &= |E_{24}| \frac{1}{\sqrt{20}} + |E_{25}| \frac{1}{\sqrt{29}} + |E_{34}| \frac{1}{\sqrt{25}} + |E_{35}| \frac{1}{\sqrt{34}} \\
 &= \left(\frac{2}{5} - \sqrt{\frac{2}{17}} + \frac{3}{\sqrt{5}} + \frac{2}{\sqrt{29}}\right)n + \left(3\sqrt{\frac{2}{17}} + \frac{4}{\sqrt{29}}\right)mn.
 \end{aligned}$$

(۴) از اینکه $\Delta = 5$ داریم

$$\begin{aligned}
 SO_{rev}(G) &= \sum_{uv \in E} \sqrt{(\Delta - d(u) + 1)^2 + (\Delta - d(v) + 1)^2} \\
 &= \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{(4)^2 + (2)^2} + \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{(4)^2 + (1)^2} \\
 &+ \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{(3)^2 + (2)^2} + \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{(3)^2 + (1)^2} \\
 &= |E_{24}| \sqrt{20} + |E_{25}| \sqrt{17} + |E_{34}| \sqrt{13} + |E_{35}| \sqrt{10} \\
 &= 2n(6\sqrt{5} + \sqrt{13} + \sqrt{17} - \sqrt{10}) + (6\sqrt{10} + 4\sqrt{17})mn.
 \end{aligned}$$

(۵)

$$\begin{aligned}
 SO^1(G) &= \sum_{uv \in E} \sqrt{(d(u) + 1)^2 + (d(v) + 1)^2} \\
 &= \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{(3)^2 + (5)^2} + \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{(3)^2 + (6)^2} \\
 &+ \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{(4)^2 + (5)^2} + \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{(4)^2 + (6)^2} \\
 &= |E_{24}| \sqrt{34} + |E_{25}| \sqrt{45} + |E_{34}| \sqrt{41} + |E_{35}| \sqrt{52} \\
 &= 2(3\sqrt{5} + 3\sqrt{34} + \sqrt{41} - 2\sqrt{13})n + 12(\sqrt{5} + \sqrt{13})mn.
 \end{aligned}$$

(۶)

$$\begin{aligned}
 ESO(G) &= \sum_{uv \in E} (d(u) + d(v)) \sqrt{d^2(u) + d^2(v)} \\
 &= 6 \sum_{uv \in E_{24}} \sqrt{(2)^2 + (4)^2} + 7 \sum_{uv \in E_{25}} \sqrt{(2)^2 + (5)^2} \\
 &+ 7 \sum_{uv \in E_{34}} \sqrt{(3)^2 + (4)^2} + 8 \sum_{uv \in E_{35}} \sqrt{(3)^2 + (5)^2} \\
 &= 6|E_{24}| \sqrt{20} + 7|E_{25}| \sqrt{29} + 7|E_{34}| \sqrt{25} + 8|E_{35}| \sqrt{34} \\
 &= 2(35 + 36\sqrt{5} + 7\sqrt{29} - 8\sqrt{34})n + 2(14\sqrt{29} + 24\sqrt{34})mn.
 \end{aligned}$$

(۲)

۳- محاسبات عددی

شاخص توپولوژیکی در یک گراف مولکولی یک مقدار عددی است که خواص فیزیکی-شیمیایی گراف مولکولی را به یک عدد مرتبط می‌کند. در این مقاله، برخی از شاخص‌های توپولوژیکی مبتنی بر درجه در یک کلاس بینهایت از نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ را بررسی کردیم. خروجی همه این شاخص‌های توپولوژیکی نانولوله‌ها در کاربرد از جمله طراحی پشتیبان‌ها با ویژگی‌های خاص برای آزدسازی کنترل‌شده داروها، مورد توجه محققین بسیاری قرار می‌گیرد. به عبارت دیگر، شاخص‌های توپولوژیکی می‌توانند در طراحی و بهینه‌سازی ساختارهای نانویی برای کاربردهای مختلف، از جمله داروسازی، مورد استفاده قرار گیرند.

در این بخش، به مقایسه عددی شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و نسخه ضربی آنها در ساختار مولکولی $TiO_2[m, n]$ برای مقادیر مختلف m و n می‌پردازیم.

مقایسه‌های عددی و گرافیکی بین تمام شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور که در این مطالعه برای ساختار مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ بررسی گردید، در جدول ۲ و شکل ۳ آورده شده است.

نتایج نشان می‌دهد رابطه مثبتی بین مقادیر $m, n \geq 1$ و این شاخص‌های توپولوژیکی وجود دارد. به عبارت دیگر با افزایش m و n مقادیر شاخص‌های توپولوژیکی نیز افزایش می‌یابد. از این رو، از این مقایسه به راحتی می‌توان دریافت که شاخص بیضوی سمبور بیشترین مقدار و شاخص تغییر یافته سمبور کمترین مقادیر را در بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور مورد مطالعه برای ساختار نانولوله‌های تیتانیا دارد. بنابراین، رابطه‌ی زیر بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور وجود دارد.

$$MSO < SO_{rev} < RSO < SO < SO^1 < EU < ESO.$$

توجه کنید که در برخی ساختارهای مولکولی مانند اسید هیالورونیک مزدوج با متوترکسات [۳۶] و بعضی داروهای ضد ویروسی [۳۷] این نامسای‌ها با این ترتیب برقرار نمی‌باشد.

جدول ۲: مقادیر عددی از شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور برای نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$.

$$\begin{aligned} \Pi_{RSO}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u)-1)^2 + (d(v)-1)^2} \\ &= (\sqrt{10})^{|E_{24}|} + (\sqrt{17})^{|E_{25}|} + (\sqrt{13})^{|E_{34}|} + (\sqrt{20})^{|E_{35}|} \\ &= 2^{(6mn+n)} \times 5^{(3mn+2n)} \times 13^n \times 17^{(2mn+n)}. \end{aligned} \quad (3)$$

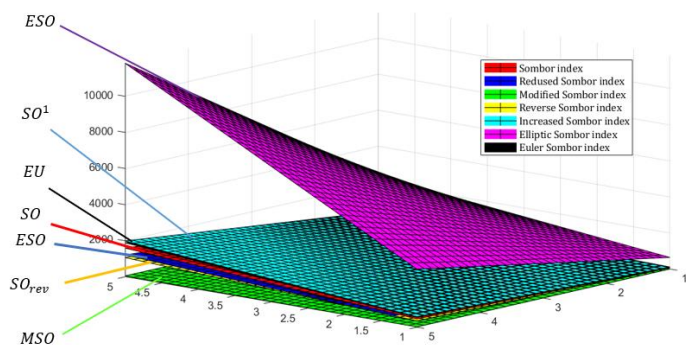
$$\begin{aligned} \Pi_{MSO}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u)^2 + d(v)^2}} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{20}}\right)^{|E_{24}|} + \left(\frac{1}{\sqrt{29}}\right)^{|E_{25}|} + \left(\frac{1}{\sqrt{25}}\right)^{|E_{34}|} + \left(\frac{1}{\sqrt{34}}\right)^{|E_{35}|} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)^{(3mn+5)} \times \left(\frac{1}{5}\right)^{5n} \times \left(\frac{1}{17}\right)^{(3mn-n)} \times \left(\frac{1}{29}\right)^{(2mn+n)}. \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{SO_{rev}}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(\Delta - d(u) + 1)^2 + (\Delta - d(v) + 1)^2} \\ &= (\sqrt{20})^{|E_{24}|} + (\sqrt{17})^{|E_{25}|} + (\sqrt{13})^{|E_{34}|} + (\sqrt{10})^{|E_{35}|} \\ &= 2^{(3mn+5n)} \times 5^{(3mn+2n)} \times 13^n \times 17^{(2mn+n)}. \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{SO^1}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{(d(u)+1)^2 + (d(v)+1)^2} \\ &= (\sqrt{34})^{|E_{24}|} + (\sqrt{45})^{|E_{25}|} + (\sqrt{41})^{|E_{34}|} + (\sqrt{52})^{|E_{35}|} \\ &= 2^{(6mn+n)} \times 13^{(3mn-n)} \times 45^{(2mn+n)} \times 201433^n. \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ESO}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v)) \sqrt{d^2(u) + d^2(v)} \\ &= (6\sqrt{20})^{|E_{24}|} + (7\sqrt{29})^{|E_{25}|} + (7\sqrt{25})^{|E_{34}|} + (8\sqrt{34})^{|E_{35}|} \\ &= 1472^{(3mn+5n+4)} \times 5^{5n} \times 17^{(3mn-n)} \times 29^{(2mn+n)}. \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{EU}(G) &= \prod_{uv \in E(G)} \sqrt{d(u)^2 + d(v)^2 + d(u)d(v)} \\ &= (\sqrt{28})^{|E_{24}|} + (\sqrt{39})^{|E_{25}|} + (\sqrt{37})^{|E_{34}|} + (\sqrt{45})^{|E_{35}|} \\ &= 7^{(6mn+n)} \times 39^{(2mn+n)} \times 2368^n. \end{aligned}$$



شکل ۳: مقایسه گرافیکی از شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور برای نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$

$[m, n]$	SO	RSO	MSO	SO_{rev}	SO^1	ESO	EU
[2,2]	297.988	224.274	10.627	213.796	373.97	2148.87	352.729
[2,3]	411.041	310.925	14.171	284.728	514.169	3010.21	486.689
[3,2]	446.982	336.412	15.941	320.693	560.955	3223.3	529.094
[3,3]	616.56	466.387	21.256	427.092	771.253	4515.31	730.034
[4,4]	1048.19	795.151	35.428	711.32	1308.74	7743.1	1241.3
[5,5]	1592.87	1210.56	53.144	1066.48	1986.42	11832.2	1886.52

جدول ۳: مقادیر عددی از شاخص‌های ضربی نوع سمبور برای نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$

$[m, n]$	Π_{SO}	Π_{RSO}	Π_{MSO}	$\Pi_{SO_{rev}}$	Π_{SO^1}	Π_{ESO}	Π_{EU}
[2,2]	3.474×10^{40}	3.48×10^{35}	2.88×10^{-41}	2.18×10^{34}	1.28×10^{48}	6.17×10^{45}	4.28×10^{46}
[2,3]	3.79×10^{57}	1.86×10^{48}	2.63×10^{-50}	1.82×10^{45}	1.04×10^{65}	8.93×10^{60}	1.37×10^{63}
[3,2]	6.47×10^{82}	2.06×10^{52}	1.54×10^{-63}	3.22×10^{50}	1.44×10^{71}	1.52×10^{66}	8.87×10^{68}
[3,3]	2.33×10^{85}	2.55×10^{71}	4.28×10^{-86}	7.77×10^{66}	3.33×10^{96}	5.5×10^{89}	5.08×10^{93}
[4,4]	1.72×10^{443}	9.94×10^{419}	5.81×10^{-444}	2.31×10^{410}	7.06×10^{461}	4.04×10^{446}	1.93×10^{457}
[5,5]	1.38×10^{216}	2.07×10^{181}	7.23×10^{-217}	5.75×10^{164}	1.21×10^{244}	3.25×10^{219}	2.35×10^{227}

همچنین، جدول ۳ و شکل ۴ مقایسه عددی و گرافیکی شاخص‌های ضربی نوع سمبور را برای ساختار مولکولی نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$ به ازای برخی از مقادیر $m, n \geq 1$ نشان می‌دهند.

نتایج عددی از جدول ۳ نشان می‌دهد که با افزایش m و n ، مقادیر شاخص‌های ضربی نوع سمبور به جز شاخص ضربی تغییر یافته سمبور افزایش می‌یابد. در مورد شاخص ضربی تغییر یافته سمبور، رابطه معکوس بین مقادیر m و n و این شاخص در ساختار نانولوله‌های تیتانیا وجود دارد. بدین معنا که با افزایش مقادیر m و n ، مقدار شاخص Π_{MSO} کاهش می‌یابد.

بر اساس این نتایج، شاخص ضربی افزایش یافته سمبور بیشترین مقدار و شاخص ضربی تغییر یافته سمبور کمترین مقادیر را در بین نسخه ضربی شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور مورد مطالعه برای ساختار نانولوله‌های تیتانیا دارد. بنابراین، رابطه‌ی زیر بین شاخص‌های ضربی نوع سمبور در این ساختار مولکولی وجود دارد.

$$\Pi_{MSO} < \Pi_{SO_{rev}} < \Pi_{RSO} < \Pi_{SO} < \Pi_{ESO} < \Pi_{EU} < \Pi_{SO^1}$$

شکل ۴: مقایسه گرافیکی از شاخص‌های ضربی نوع سمبور برای نانولوله‌های تیتانیا $TiO_2[m, n]$

۴- آنالیز داده و بحث

در این بخش، کارایی شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور را با ایجاد یک QSPR بین شاخص‌های مورد مطالعه و خواص فیزیکی-شیمیایی بررسی می‌کنیم.

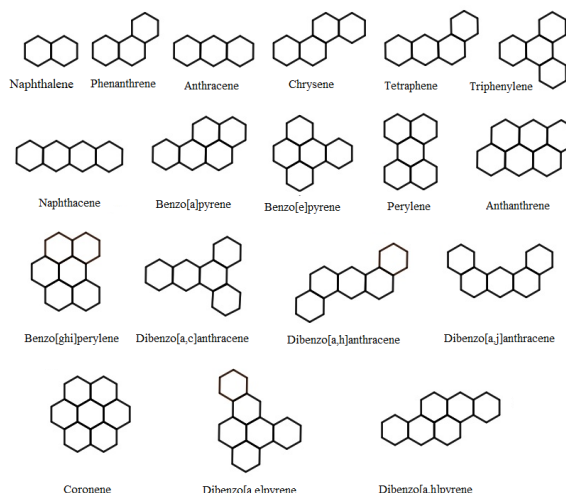
با توجه به ساختار نامتناهی نانولوله‌های تیتانیا مرتبط کردن شاخص‌های توپولوژیکی با خواص فیزیکی-شیمیایی نانولوله‌ها بسیار پیچیده است. در مطالعات مشابه [۴۱، ۴۲]، از ایزومرهای اکتان به‌عنوان مدل ساده شده به‌ترتیب برای ساختارهای نامتناهی داروهای ضد سرطانی و نانولوله‌های کربنی استفاده شده است.

هیدروکربن‌های بنزنوئیدی از نظر ساختار شیمیایی و هندسی شباهت‌هایی با نانولوله‌های تیتانیا دارند که می‌تواند به‌عنوان یک مدل ساده شده برای نانولوله‌ها در نظر گرفته شود.

Molecule	BP	MR	FP	E	MV	P
Naphthalene	221.5±7.0	44.1±0.3	78.9±0.0	43.9±0.8	123.5±3.0	17.5±0.5
Phenanthrene	337.4±9.0	61.9±0.3	146.6±12.8	55.8±0.8	157.7±3.0	24.6±0.5
Anthracene	337.4±9.0	61.9±0.3	146.6±12.8	55.8±0.8	157.7±3.0	24.6±0.5
Chrysene	448.0±0.0	79.8±0.3	209.1±13.7	67.9±0.8	191.8±3.0	31.6±0.5
Tetraphene	436.7±12.0	79.8±0.3	209.1±13.7	66.7±0.8	191.8±3.0	31.6±0.5
Triphenylene	425.0±0.0	79.8±0.3	209.1±13.7	65.3±0.8	191.8±3.0	31.6±0.5
Naphthacene	436.7±12.0	79.8±0.3	209.1±13.7	66.7±0.8	191.8±3.0	31.6±0.5
Benzo[a]pyrene	495.0±0.0	90.3±0.3	228.6±13.7	73.4±0.8	196.1±3.0	35.8±0.5
Benzo[e]pyrene	467.5±12.0	90.3±0.3	228.6±13.7	70.2±0.8	196.1±3.0	35.8±0.5
Perylene	467.5±12.0	90.3±0.3	228.6±13.7	70.2±0.8	196.1±3.0	35.8±0.5
Anthanthrene	497.1±12.0	100.8±0.3	247.2±13.7	73.6±0.8	200.4±3.0	40.0±0.5
Benzo[ghi]perylene	501.0±0.0	100.8±0.3	247.2±13.7	74.1±0.8	200.4±3.0	40.0±0.5
Dibenzo[a,c]anthracene	518.0±0.0	97.6±0.3	264.5±15.1	76.1±0.8	225.9±3.0	38.7±0.5
Dibenzo[a,h]anthracene	524.7±17.0	97.6±0.3	264.5±15.1	76.9±0.8	225.9±3.0	38.7±0.5
Dibenzo[a,j]anthracene	524.7±17.0	97.6±0.3	264.5±15.1	76.9±0.8	225.9±3.0	38.7±0.5
Coronene	525.6±17.0	111.4±0.3	265.2±15.1	77.0±0.8	204.7±3.0	44.1±0.5
Dibenzo[a,e]pyrene	552.3±17.0	108.1±0.3	282.0±15.1	80.2±0.8	230.2±3.0	42.9±0.5
Dibenzo[a,h]pyrene	552.3±17.0	108.1±0.3	282.0±15.1	80.2±0.8	230.2±3.0	42.9±0.5

نانولوله‌های تیتانیا و هیدروکربن‌های بنزنوئیدی دارای ساختارهای حلقوی هستند به طوری که در نانولوله‌های تیتانیا، اتم‌های تیتانیوم و اکسیژن در یک آرایش حلقوی قرار می‌گیرند که شباهتی به حلقه‌های بنزنی دارد. همچنین، پیوندهای بین اتم‌ها در هر دو سیستم عمدتاً کووالانسی هستند. برای هیدروکربن‌های بنزنوئیدی داده‌های تجربی بیشتری در مورد خواص فیزیکی-شیمیایی وجود دارد که این امر امکان مقایسه و اعتبارسنجی بهتر نتایج محاسباتی را فراهم می‌کند.

بنابراین، ۱۸ هیدروکربن بنزنوئیدی که در شکل ۵ نشان داده شده است را برای این مطالعه در نظر می‌گیریم.



شکل ۵: گراف‌های مولکولی از هیدروکربن‌های بنزنوئیدی.

در جدول ۴، شش مورد از خواص فیزیکی-شیمیایی این مولکول‌ها شامل نقطه جوش (BP)، شکست مولی (MR)، نقطه اشتعال (FP)، آنتالپی تبخیر (E)، حجم مولی (MV) و قطبش پذیری (P) ارائه شده که از پایگاه داده ChemSpider (<http://www.chemspider.com>) گرفته شده است.

جدول ۴: خواص فیزیکی-شیمیایی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی.

جدول‌های ۵ و ۶ به ترتیب مقادیر شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و شاخص‌های ضربی نوع سمبور از گراف مولکولی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی را نشان می‌دهند.

جدول ۵: مقادیر شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور برای گراف‌های مولکولی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی.

Molecule	SO	RSO	MSO	SO _{rev}	SO ¹	ESO	EU
Naphthalene	35.63	20.26	3.46	27.33	51.11	165.45	43.42
Phenanthrene	54.16	31.80	4.85	37.46	76.67	263.73	65.99
Anthracene	54.30	32.03	4.81	37.69	76.77	263.02	66.05
Chrysene	72.68	43.34	6.22	47.59	102.22	362.01	88.56
Tetraphene	72.82	43.57	6.19	47.82	102.33	361.29	88.62
Triphenylene	72.54	43.11	6.26	47.36	102.12	362.72	88.51
Naphthacene	72.96	43.80	6.16	48.05	102.43	360.58	88.68
Benzo[a]pyrene	85.55	52.06	6.89	52.06	119.29	437.66	104.21
Benzo[e]pyrene	85.41	51.83	6.93	51.83	119.19	438.38	104.15
Perylene	85.41	51.83	6.93	51.83	119.19	438.38	104.15
Anthanthrene	98.42	60.77	7.57	56.53	136.38	513.32	119.86
Benzo[ghi]perylene	98.28	60.54	7.60	56.30	136.27	514.03	119.79
Dibenzo[a,c]anthracene	91.21	54.89	7.61	57.72	127.78	460.29	111.14
Dibenzo[a,h]anthracene	91.35	55.12	7.57	57.95	127.88	459.58	111.19
Dibenzo[a,j]anthracene	91.35	55.12	7.57	57.94	127.88	459.58	111.19
Coronene	111.15	69.26	8.28	60.77	153.34	589.68	135.44
Dibenzo[a,e]pyrene	103.94	63.37	8.31	61.96	144.75	536.66	126.73
Dibenzo[a,h]pyrene	104.08	63.60	8.28	62.19	144.85	535.94	126.78

جدول ۶: مقادیر شاخص‌های توپولوژیکی ضربی نوع سمبور برای گراف‌های مولکولی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی.

می‌باشد. نتایج نشان می‌دهد، دو شاخص افزایش یافته سمبور و معکوس سمبور قدرت پیش‌بینی بیشتری نسبت به سایر شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور دارند.

$$BP = 9.084 SO_{rev} - 5.111,$$

$$E = 1.009 SO_{rev} + 17.895,$$

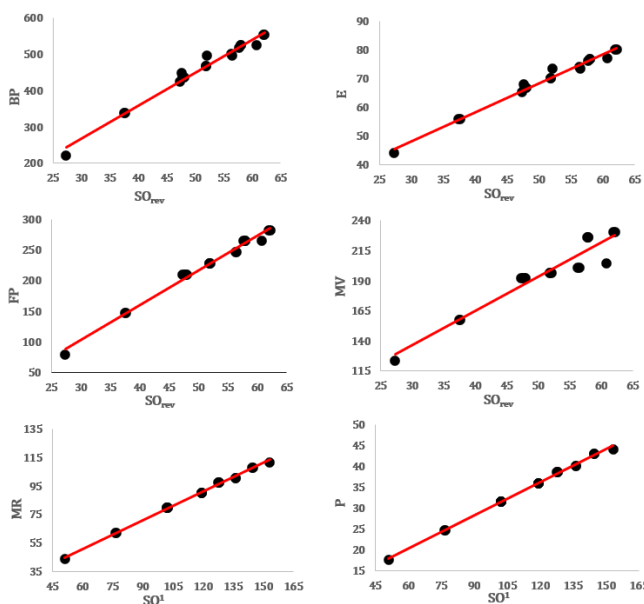
$$FP = 5.636 SO_{rev} - 65.325,$$

$$MR = 0.668 SO^1 + 10.931,$$

$$MV = 2.855 SO_{rev} + 50.552,$$

$$P = 0.265 SO^1 + 4.356.$$

نمودار پراکنش مدل‌های رگرسیون خطی پیش‌بینی کننده خواص فیزیکی-شیمیایی مولکول‌های هیدروکربن‌های بنزنوئیدی با شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور در شکل ۶ نشان داده شده است. این یافته‌ها نشان می‌دهد که این شاخص‌ها می‌توانند خواص مورد نظر را پیش‌بینی کنند.



شکل ۶: نمودار پراکنش مدل‌های رگرسیون خطی برازش شده برای شاخص معکوس سمبور و شاخص افزایش یافته سمبور.

۵- نتیجه گیری

شبکه‌های پیچیده در طبیعت مانند شبکه‌های شیمیایی، بیولوژیکی و اجتماعی وجود دارند که نظریه گراف ابزار ریاضی قدرتمندی برای

Molecule	Π_{SO}	Π_{RSO}	Π_{MSO}	$\Pi_{SO_{rev}}$	Π_{SO^1}	Π_{ESO}	Π_{EU}
Naphthalene	3.67×10^5	565.68	2.72×10^{-6}	1.81×10^4	2.06×10^7	1.06×10^9	3.24×10^6
Phenanthrene	2.42×10^6	3.2×10^4	4.11×10^{-9}	5.12×10^5	6.99×10^{10}	6.99×10^{11}	5.76×10^9
Anthracene	2.63×10^6	4×10^4	3.79×10^{-9}	6.4×10^5	7.29×10^{10}	7.58×10^{11}	6.08×10^9
Chrysene	1.61×10^{11}	1.81×10^6	6.22×10^{-12}	1.44×10^7	2.37×10^{14}	4.63×10^{14}	1.02×10^{13}
Tetraphene	1.74×10^{11}	2.26×10^6	5.74×10^{-12}	1.81×10^7	2.47×10^{14}	5.02×10^{14}	1.08×10^{13}
Triphenylene	1.48×10^{11}	1.45×10^6	6.74×10^{-12}	1.16×10^7	2.28×10^{14}	4.27×10^{14}	6.69×10^{12}
Naphthacene	1.88×10^{11}	2.83×10^6	5.29×10^{-12}	2.26×10^7	2.58×10^{14}	5.43×10^{14}	1.14×10^{13}
Benzo[a]pyrene	1.33×10^{13}	5.12×10^7	7.52×10^{-14}	5.12×10^7	4.48×10^{16}	3.83×10^{16}	1.52×10^{15}
Benzo[e]pyrene	1.23×10^{13}	4.09×10^7	8.14×10^{-14}	4.09×10^7	4.29×10^{16}	3.54×10^{16}	1.44×10^{15}
Perylene	1.23×10^{13}	4.09×10^7	8.14×10^{-14}	4.09×10^7	4.29×10^{16}	3.54×10^{16}	1.44×10^{15}
Anthanthrene	1.1×10^{15}	1.45×10^9	9.08×10^{-16}	1.81×10^8	8.44×10^{16}	3.17×10^{18}	2.24×10^{17}
Benzo[ghi]perylene	1.02×10^{15}	1.16×10^9	9.84×10^{-16}	1.45×10^8	8.11×10^{16}	2.93×10^{18}	2.13×10^{17}
Dibenzo[a,c]anthracene	1.06×10^{14}	1.02×10^8	9.39×10^{-15}	4.09×10^8	8.06×10^{17}	3.06×10^{17}	1.82×10^{16}
Dibenzo[a,h]anthracene	1.15×10^{14}	1.28×10^8	8.67×10^{-15}	5.12×10^8	8.39×10^{17}	3.32×10^{17}	1.92×10^{16}
Dibenzo[a,j]anthracene	1.15×10^{14}	1.28×10^8	8.67×10^{-15}	5.12×10^8	8.39×10^{17}	3.32×10^{17}	1.92×10^{16}
Coronene	8.41×10^{16}	3.28×10^{10}	1.19×10^{-17}	5.12×10^8	1.53×10^{21}	2.42×10^{20}	3.15×10^{19}
Dibenzo[e]pyrene	8.13×10^{15}	2.32×10^9	1.23×10^{-16}	1.16×10^9	1.46×10^{20}	2.34×10^{19}	2.55×10^{18}
Dibenzo[h]pyrene	8.80×10^{15}	2.89×10^9	1.14×10^{-16}	1.45×10^9	1.52×10^{20}	2.54×10^{19}	2.69×10^{18}

در جدول ۷، ضریب همبستگی پیرسون بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و خواص فیزیکی-شیمیایی مولکول‌های هیدروکربن‌های بنزنوئیدی محاسبه شده است. با توجه به جدول، رابطه منفی معنادار بین شاخص ضریب تغییر یافته سمبور با تمامی خواص فیزیکی-شیمیایی به جز حجم مولی (MV) از مولکول‌های هیدروکربن‌های بنزنوئیدی مشاهده شد ($P\text{-value} < 0.001$). در مورد سایر شاخص‌های نوع سمبور، رابطه مثبت قوی معنادار بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و تمامی خواص فیزیکی-شیمیایی مشاهده شده است ($P\text{-value} < 0.05$).

جدول ۷: ضریب همبستگی بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و خواص فیزیکی-شیمیایی برای گراف‌های مولکولی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی.

Index	BP	MR	FP	E	MV	P
SO	0.959	0.998	0.961	0.961	0.886	0.998
RSO	0.950	0.995	0.951	0.953	0.87	0.995
MSO	0.983	0.998	0.988	0.986	0.939	0.998
SO_{rev}	0.990	0.992	0.995	0.992	0.958	0.992
SO^1	0.962	0.999	0.965	0.965	0.893	0.999
ESO	0.944	0.993	0.946	0.947	0.861	0.993
EU	0.958	0.998	0.96	0.961	0.885	0.998
Π_{SO}	0.800	0.821	0.809	0.805	0.773	0.821
Π_{RSO}	0.800	0.821	0.809	0.805	0.773	0.821
Π_{MSO}	-0.481	-0.564	-0.476	-0.488	-0.387	-0.564
$\Pi_{SO_{rev}}$	0.615	0.643	0.636	0.634	0.67	0.645
Π_{SO^1}	0.804	0.818	0.813	0.809	0.784	0.818
Π_{ESO}	0.800	0.821	0.809	0.805	0.773	0.821
Π_{EU}	0.800	0.821	0.809	0.805	0.773	0.821

با استفاده از مدل رگرسیون خطی، بیشترین مقدار R^2 و کمترین خطای استاندارد، معادلات خطی زیر بهترین تقریب برای هر یک از خواص فیزیکی-شیمیایی مولکولی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی

مراجع

- [1] D. Bonchev, D. Rouvray, Eds. *Chemical Graph Theory: Introduction and Fundamentals*, Abacus Press/Gordon & Breach, New York, 1991.
- [2] A. Mauri, V. Consonni, R. Todeschini, Molecular descriptors, in *Handbook of Computational Chemistry*, J. Leszczynski, Ed., Springer Netherlands, Dordrecht, Netherlands, 2016.
- [3] R. Todeschini, V. Consonni, *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*, Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [4] J. C. Dearden, "The Use of Topological Indices in QSAR and QSPR Modeling," *Advances in QSAR Modeling*, 24, 57-88, 2017.
- [5] F. Movahedi, "Matching polynomials for some nanostar dendrimers", *Asian. Eur. J. Math.*, 14(10), 2150188, 2021.
- [6] R. B. King, *Chemical Applications of Topology and Graph Theory*, Elsevier, 1983.
- [7] I. Gutman, "Degree-based topological indices", *Croat. Chem. Acta*, 86, 351-361, 2013.
- [8] R.A. Evarestov, Y.F. Zhukovskii, A.V. Bandura, S. Piskunov, "Symmetry and models of single-walled TiO_2 nanotubes with rectangular morphology", *Cent. Eur. J. Phys.* 9(2), 492-501 2011.
- [9] S. Jafari, B. Mahyad, H. Hashemzadeh, S. Janfaza, T. Gholikhani, L. Tayebi, "Biomedical applications of TiO_2 nanostructures recent advances", *Int. J. Nanomed*, 15, 3447-3470, 2020.
- [10] M.A. Irshad, R. Nawaz, M.Z. Ur Rehman, M. Adrees, M. Rizwan, S. Ali, S. Ahmad, S. Tasleem, "Synthesis, characterization and advanced sustainable applications of titanium dioxide nanoparticles: A review", *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, 212, p.111978, 2021.
- [11] M.A. Malik, "Two degree-distance based topological descriptors of some product graphs", *Discret. Appl. Math*, 236, 315-328, 2018.
- [12] M.A. Malik, M. Imran, "On multiple Zagreb index of TiO_2 nanotubes", *Acta Chim. Slov*, 62(4), 973-976, 2015.
- [13] S. Mondal, M. Imran, N. De, A. Pal, "Neighborhood M-polynomial of titanium

مدل‌سازی آنها می‌باشد. در این راستا با استفاده از مدل QSPR خواص فیزیکی-شیمیایی ساختارهای مولکولی از ترکیبات شیمیایی مورد تجزیه و تحلیلی قرار می‌گیرد. در این مقاله، روی ارتباط شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور با نانولوله‌های تیتانیا متمرکز شده و مقادیر این شاخص‌ها را برآورد می‌کنیم.

بر اساس مقادیر بدست آمده از این شاخص‌ها در جدول ۲ و شکل ۳، بیشترین مقدار مربوط به شاخص بیضوی سمبور و کمترین مقدار مربوط به شاخص تغییر یافته سمبور در بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور می‌باشند. نتایج در جدول ۳ و شکل ۴ نشان می‌دهد که در بین شاخص‌های ضریبی سمبور از ساختار نانولوله‌های تیتانیا، کمترین و بیشترین مقدار به ترتیب مربوط به شاخص ضریبی تغییر یافته سمبور و شاخص ضریبی افزایش یافته سمبور می‌باشد. با ایجاد یک مدل QSPR، قدرت پیش‌بینی شاخص‌های نوع سمبور با استفاده از مدل رگرسیون خطی بررسی گردید. در این مطالعه، ۱۸ مولکول هیدروکربن‌های بنزنوئیدی مطابق با شکل ۵ و شش خاصیت فیزیکی-شیمیایی این مولکول‌ها در نظر گرفته شد. با محاسبه ضریب همبستگی بین شاخص‌های توپولوژیکی نوع سمبور و خواص فیزیکی-شیمیایی این مولکول‌ها، قدرت پیش‌بینی شاخص‌های نوع سمبور مطالعه شده در این مقاله بررسی گردید. مدل‌سازی QSPR نشان می‌دهد که بهترین شاخص توپولوژیکی برای پیش‌بینی خواص فیزیکی-شیمیایی هیدروکربن‌های بنزنوئیدی، شاخص معکوس سمبور برای نقطه جوش، آنتالپی تبخیر، نقطه اشتعال و حجم مولی است. شاخص افزایش یافته سمبور نیز بهترین پیش‌بینی کننده برای شکست مولی و قطبش پذیری مولکول‌های هیدروکربن‌های بنزنوئیدی می‌باشد.

این مقادیر در پیش‌بینی و مقایسه خواص فیزیکی-شیمیایی مفید است. همچنین از اینکه ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی از ساختار مولکول‌ها بدون استفاده از آزمایشگاه با استفاده از شاخص‌های توپولوژیکی قابل محاسبه می‌باشند، مقرون به صرفه است.

- [25] M. Hasani, and M. Ghods, "Calculation of topological indices along with MATLAB coding in QSPR analysis of calcium channel-blocking cardiac drugs", *J Math Chem*, 2024.
<https://doi.org/10.1007/s10910-023-01570-9>
- [26] I. Gutman, "Geometric Approach to Degree-Based Topological Indices: Sombor Indices", *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 86, 11-16, 2021.
- [27] V.R. Kulli, and I. Gutman, "Computation of Sombor Indices of Certain Networks", *Int. J. Appl. Chem*, 8(1), 1-5, 2021.
- [28] N. N. Swamy, T. Manohar, B. Sooryanarayana, I. Gutman, "Reverse Sombor index", *Bull. Int. Math. Virtual Inst*, 12(2), 267-272, 2022.
- [29] K.C. Das, A. Ghalavand, A.R. Ashrafi, "On a conjecture about the Sombor index of graphs", *Symmetry*, 13(10) p.1830, 2021.
- [30] I. Gutman, B. Furtula, M.S. Oz, "Geometric approach to vertex-degree-based topological indices-Elliptic sombor index", theory and application, *Int. J. Quantum Chem*, 124(2), e27346, 2024.
- [31] Z. Tang, Y. Li, H. Deng, "The Euler Sombor index of a graph", *Int. J. Quantum Chem*, 124(9), p.e27387, 2024.
- [32] I. Radžeporić, Chemical applicability of Sombor indices, *J. Serb. Chem. Soc*, 86 (5) 445-457, 2021.
- [33] H. Liu, H. Chen, Q. Xiao, X. Fang, Z. Tang, "More on Sombor indices of chemical graphs and their applications to the boiling point of benzenoid hydrocarbons", *Int J Quantum Chem*, 121(17), e26689, 2021.
- [34] H. Deng, Z. Tang, R. Wu, "Molecular trees with extremal values of Sombor indices", *Int J Quantum Chem*, 121: e26622, 2021.
- [35] H. Liu, L. You, Y. Huang, "Ordering Chemical Graphs by Sombor Indices and Its Applications", <https://arxiv.org/abs/2103.05995>, 2021.
- [36] F. Movahedi, M. H. Akhbari, "Degree-based topological indices of the molecular structure of hyaluronic acid-methotrexate conjugates in cancer treatment", *Int. J. Quantum Chem.*, 123, e27106, 2023.
- [37] Z. Samiei, F. Movahedi, "Investigating Graph Invariants for Predicting Properties of Chemical Structures of Antiviral Drugs", *Polycyclic Aromat. Compd*, 2023.
<https://doi.org/10.1080/10406638.2023.2289625>
- compounds", *Arab. J. Chem*, 14(8), p.103244, 2021.
- [14] J.R. Tousi, M. Ghods, "Calculation of Revan topological indices in $TiO_2[m, n]$ nanotubes", *J. Inf. Optim. Sci*, 44(5), 845-854, 2023.
- [15] J.R. Tousi, M. Ghods, "Computing K-Banhatti and K-Hyper Banhatti indices of Titania nanotubes $TiO_2[m, n]$ ", *J. Inf. Optim. Sci*, 44 (2), 207-216, 2023.
- [16] A. Raheem, M. Javaid, W. C. Teh, S. Wang, J. Liu, "M-polynomial method for topological indices of 2D-lattice of threelayered single-walled Titania nanotubes", *J. Inf. Optim. Sci*, 41(3), 743-753, 2020.
- [17] M. Javaid, J.B. Liu, M.A. Rehman, S. Wang, "On the certain topological indices of titania nanotube $TiO_2[m, n]$ ", *Z. Naturforsch*, 72(7), 647-654, 2017.
- [18] A. Iranmanesh, Y. Alizadeh, "Computing Szeged and Schultz Indices of $HAC_5C_6C_7[p, q]$ nanotube by GAP Program", *Digest. J. Nanomater. Bios*, 4(1), 67-72, 2009.
- [19] M. Liu, M.R. Rezaei, M.R. Farahani, M.N. Husin, M. Imran, "The omega polynomial and the cluj-ilmenau index of an infinite class of the titania nanotubes $TiO_2(m, n)$ ", *J. Comput. Theor. Nanosci*, 14(7), 3429-3432, 2017.
- [20] W. Gao, M.N. Husin, M.R. Farahani, M. Imran, "On the edges version of atom-bond connectivity and eometric arithmetic indices of nanocones $CNCK[n]$ ", *J. Comput. Theor. Nanosci*, 13(10), 6741-6746, 2016.
- [21] S.M. Kang, M.K. Siddiqui, N. Abdul Rehman, M. Naeem, M.H. Muhammad, "Topological Properties of 2-Dimensional Silicon-Carbons", *IEEE Access*, 6, 59362-59368, 2018.
- [22] M. Munir, W. Nazeer, S. Rafique and S.M. Kang, "M-polynomial and related topological indices of nanostar dendrimers". *Symmetry*, 8, 97, 2016.
- [23] M. Hasani, and M. Ghods, "Predicting the physicochemical properties of drugs for the treatment of Parkinson's disease using topological indices and MATLAB programming", *Mol. Phys*, 122(9), 2023.
- [24] M. Hasani, and M. Ghods, "Topological indices and QSPR analysis of some chemical structures applied for the treatment of heart patients", *Int. J. Quantum Chem*, 124(1), e27234, 2024.

- [38] R. Todeschini, V. Consonni, “New local vertex invariants and molecular descriptors based on functions of the vertex degrees”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 64(2), 359-372, 2010.
- [39] H. Lio, “Multiplicative Sombor index of graphs”, *Discrete Math. Lett*, 9, 80-85, 2022.
- [40] V.R. Kulli, “Multiplicative Sombor indices of certain nanotubes”, *Int. J. Math. Arch*, 12(3), 1-5, 2021.
- [41] S.A.K. Kirmani, P. Ali, F. Azam, P. A. Alvi, “On Ve-Degree and Ev-Degree Topological Properties of Hyaluronic Acid-Anticancer Drug Conjugates with QSPR”, *J. Chem*, 2021(1), p.3860856, 2021.
- [42] M. C. Shanmukha, A. Usha, M. K. Siddiqui, K. C. Shilpa, A. Asare-Tuah, “Novel Degree-Based Topological Descriptors of Carbon Nanotubes”, *J. Chem*, 2021(1), p.3734185, 2021.



Investigating Sombor-type topological indices in Titania nanotube structures

Fateme Movahedi^{1,*}; Mohammad Hadi Akhbari²

¹Department of mathematics, Golestan university, Golestan

²Department of Mathematics, Islamic Azad University, Estahban

Abstract: In Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) models, graph-theoretical techniques are employed to explore the connections between the physicochemical properties of chemical compounds and their molecular structure properties. Topological indices serve as valuable tools for predicting the properties of chemical compounds and are used to develop QSPR studies. Titania nanotubes play a crucial role in materials science, finding practical applications in catalytic materials, gas sensors, biomedical devices, and solar cells. In this paper, we compute Sombor-type topological indices of an infinite class of titania nanotubes using the edge-partition strategy in graph theory modeling. The results of this study showed that among Sombor-type topological indices, the modified Sombor index and the elliptic Sombor index have the lowest and highest values, respectively, for the molecular graph of titania nanotubes. Also, among the multiplicative Sombor indices in the structure of titania nanotubes, the lowest and the highest values are related to the multiplicative modified Sombor index and the multiplicative increased Sombor index, respectively. Furthermore, using QSPR modeling, the predictive power of Smbor-type indices for the physico-chemical properties of benzoic hydrocarbons was investigated using a linear regression model. The results of this study showed that the inverse Sombor index is the best index for predicting boiling point, Enthalpy of vaporization, flash point and molar volume, while the increased Sombor index is the best predictor for the molar refractivity and polarizability of benzoic hydrocarbon molecules. The results of this paper, offer valuable insights into the structural characteristics of titania nanotubes and contribute to advancing topological indices for predicting the behavior of other chemical compounds.

Keywords: Topological index, Sombor index, Multiplicative Sombor index, QSPR modeling, Titania nanotubes.