فهرست مطالب

فصل ۱ مقدمات و پیش نیازها **۵**

۱.۱ مفاهیم جبری ۶

۲.۱ ساختار نانولوله‌ها و سیستم‌های شش‌ضلعی ۲۳

۳.۱ ساختار ککوله در نانولوله‌ها ۳۲

۴.۱ معرفی پوشش‌ها و ساختارهای کلار ۴۹

فصل ۲ ساختارهای ککوله نانولوله بسته‌ی صندلی **۵۹**

۱.۲ روش ماتریس تبدیل ۶۰

۲.۲ یک تحلیل تقریبی ۷۶

۳.۲ یک کاربرد (محاسبه) ۸۵

فصل ۳ ساختارهای ککوله نانولوله بسته زیگ زاگ **۱۲۵**

۱.۳ الگوریتم محاسبه ۱۲۶

۲.۳ محاسبات جبری ۱۴۱

۳.۳ محاسبه‌ی ماتریسی ۱۴۴

۴.۳ کاربرد (روش جبری) ۱۵۱

فصل ۴ پوشش‌ها و ساختارهای کلار ۱۶۳

۱.۴ تساوی $cc(H) = n\ell(H)$ ۱۶۴

۲.۴ الگوهای تشدید ۱۶۸

۳.۴ توصیف $cs(H) = cc(H)$ ۱۸۰

۴.۴ ساخت سیستم‌های با $cs < cc$ ۲۰۱

۵.۴ بررسی دندریمرهای نانو ستاره ۲۰۷

مراجع ۲۱۷

فهرست تصاویر ۲۲۳

فهرست جداول ۲۳۱

فهرست راهنما ۲۳۳

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی ۲۳۷

مقدمه

با گسترش جنبه‌های مختلف علم ریاضی، تلفیق این علم با سایر علوم، از جمله دانش شیمی و بررسی ساختار مولکول‌های شیمیایی، دور از انتظار نیست. کلیه ساختارهای نانوکربنی و از جمله آنها، نانولوله‌ها و دستگاه‌های شش‌ضلعی، در سال‌های اخیر به طور قابل ملاحظه‌ای مورد مطالعه و توجه دانشمندان و محققان علوم مختلف قرار گرفته است. محاسبه شاخص‌های توپولوژیک این ساختارها، کمک بزرگی به کشف نتایج جدید در زمینه علم نانو کرده است.

هنگامی که به یک مولکول یا ساختار نانوکربنی به چشم یک گراف می‌نگریم، می‌توان با محاسبه شاخص‌های توپولوژیک و بررسی این گراف‌های مولکولی، بسیاری از خواص آنها، نظیر نقطه ذوب، نقطه جوش، انرژی تشدید و غیره را شناسایی و مورد مطالعه قرار داد. اهمیت این نوع مطالعات، در بدست آوردن خواص مولکول‌ها، بدون نیاز به ابزارهای آزمایشگاهی و مطالعات شیمیایی است.

در این کتاب ساختار نانولوله‌های کربنی معرفی و مورد مطالعه قرار گرفته است. هم‌چنین ساختار نوعی دیگر از نانوساختارها به نام سیستم‌های شش‌ضلعی که گراف‌های مولکولی آنها مسطح هستند نیز، بررسی می‌شود. ساختارهای مورد بحث در این کتاب شامل ساختارهای ککوله و ساختارها و پوشش‌های کلار می‌باشد. ساختار کلار یک گراف

مولکولی صرفاً برای مولکول‌های شیمیایی تعریف شده و مطلبی کاملاً جدید است که تا کنون مورد بررسی دقیق قرار نگرفته است.

در فصل اول کتاب، تعاریف و قضایایی از نظریه‌ی گراف آورده شده و کلیه ساختارهای مورد مطالعه در فصل‌های بعدی، به صورت مفصل توضیح داده شده است. این فصل پیش نیازی برای مطالعه فصول بعدی کتاب است.

فصل‌های دوم و سوم، ساختارهای ککوله را در نانولوله‌های صندلی شکل و زیگ زاگ مورد بررسی قرار داده است و الگوریتمی برای محاسبات ارائه می‌دهد. در پایان هر یک از این فصول، محاسبات خود را برای نانولوله‌های خاصی ارائه نموده‌ایم. در فصل دوم، علاوه بر محاسبه دقیق، یک تحلیل تقریبی را به کمک ریاضیات عمومی و قضایای نظریه‌ی گراف آورده شده است.

فصل چهارم که بیشتر از فصول قبل به درس نظریه‌ی گراف نزدیک می‌شود، ساختارهای جدید کلار را بررسی نموده و قضایای متنوعی را در این زمینه اثبات می‌کند. در بخش پایانی این فصل، نتایج جدیدی که در مورد دسته‌ای خاص از گراف‌های مولکولی به نام دندریمرهای نانوستاره به‌دست آمده، آورده شده که همگی حاصل کار مؤلفین است.

این کتاب می‌تواند به عنوان قسمتی از درس نظریه‌ی گراف یا نانومحاسبات، توسط اساتید محترم برای مقاطع کارشناسی و کارشناسی ارشد تدریس گردد. با توجه به اینکه مطالب آورده شده همگی جدیدند، دانشجویان این مقاطع می‌توانند برای تحقیقات بیشتر، از این مباحث استفاده کنند. امید است این کتاب بتواند برای اساتید و دانشجویان و محققان عزیز سودمند واقع گردد.

بر خود لازم می‌دانیم از اعضای محترم شورای انتشارات دانشگاه یزد به ویژه جناب آقای دکتر انصاری ریاست محترم شورا تشکر نمائیم. از آقای دکتر محمد فرشی و آقای دکتر مجتبی قربانی به خاطر نقطه نظرات ارزنده‌ای که برای بهبود کیفیت کتاب ابراز

داشتند و نیز سرکار خانم ساحلی که زحمت رسم شکلهای کتاب را علاوه بر مطالعه دقیق آن برعهده داشتند سپاسگزاری می‌نمائیم. همچنین از سرکارخانم آقابیگی، کارشناس محترم انتشارات دانشگاه یزد که ویراستاری ادبی کتاب را به عهده داشته‌اند، قدردانی می‌گردد.

از کلیه‌ی خوانندگان ارجمند کتاب درخواست می‌نمائیم تا با ارسال نقطه نظرات خویش برای مؤلفین، علاوه بر غنای کیفی و کمی در چاپ‌های بعدی، در گسترش این زمینه از علوم نقش فعال و مؤثری ایفا نمایند.

بهار ۱۳۹۴