فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه ۱

فصل اول: آشنایی با نظریه گراف ۵

۱. ۱ گراف دوگان و اصل لیپ فراگ..... ۲۰

۲. ۱ مسایل و پروژه‌هایی برای مطالعه بیشتر ۲۷

فصل دوم: معرفی شاخص‌های توپولوژیک ۳۳

۲ شاخص وینر، سگد و پادماکار – ایوان ۳٤

۲. ۲ مثال‌های حل شده..... ۷۱

۳. ۲ چندجمله‌ای‌های امگا و سادهانا ۸۷

٤. ۲ چندجمله‌ای‌های امگا و سادهانا برای گراف زنجیر..... ۹۵

۵. ۲ چندجمله‌ای‌های امگا و سادهانای حاصل‌ضرب دو گراف..... ۱۰۷

٦. ۲ مسایل و پروژه‌هایی برای مطالعه بیشتر ۱۱۹

عنوان **صفحه**

فصل سوم: محاسبه شاخص‌های توپولوژیک ۱۲۵

۱. ۳ شاخص‌های توپولوژیک فولرین‌ها ۱۲۶

۲. ۳ چندجمله‌ای‌های شمارشی ۱۶۲

۳. ۳ چندجمله‌ای‌های امگا و سادهانای فولرین‌ها ۱۷۳

٤. ۳ مسایل و پروژه‌هایی برای مطالعه بیشتر ۱۹۵

فصل چهارم: آشنایی با نرم افزار *GAP* ۱۹۹

۱. ٤ توابع در *GAP* ۲۰۲

۲. ٤ حلقه‌های تکرار در *GAP* ۲۱۵

۳. ٤ گروه‌های جایگشتی در *GAP* ۲۲٤

٤. ٤ مسایل و پروژه‌هایی برای مطالعه بیشتر ۲۳٦

٥. ٤ آشنایی با نرم افزار *Hyper Chem* ۲۳۹

٦. ٤ آشنایی با نرم افزار *Topo Cluj* ۲٥۰

ضمائم: برنامه‌های کامپیوتری ۲٥٥

مراجع ۲۸۷

مقدمه

فولرین‌ها از مهم‌ترین عناصر ساخته شده از کربن در طبیعت هستند و لذا مطالعه ریاضیات حاکم بر رفتار آن‌ها می‌تواند به درک بهتری از آن‌ها منجر شود. مولکول C_{60} اولین فولرینی بود که مورد توجه دانشمندان قرار گرفت. مطالعه گراف قفسی مولکول C_{60} به سال ۱۵۰۰ و در آثاری از لئوناردو داوینچی باز می‌گردد. در همان سال‌ها نقاشی به نام آلبرشت، گراف C_{60} را با استفاده از ۱۲ پنج ضلعی و ۲۰ شش ضلعی رسم نمود. در سال ۱۹۷۰ شیمی‌دانی به نام اوزاوا با در نظر گرفتن گروه تقارن‌های هندسی مولکول C_{60} ثابت نمود که این مولکول با گروه تقارنی I_h، در صورت وجود، پایداری زیادی خواهد داشت. نهایتا در سال ۱۹۸۵، کروتو، اسمالی و تیم آن‌ها موفق به ساخت این مولکول در آزمایشگاه شدند. این کشف منجر به دریافت جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۸۵ گردید.

مطالعه ریاضی فولرین‌ها، اساسا مبتنی بر نظریه گراف و گروه‌های متناهی می‌باشد. در مبحث ریاضی- شیمی، گراف یک مولکول فولرین به یک گراف فولرینی معروف شده است. مطالعه این گراف‌ها، محاسبه گروه خودریختی

و شمارش تعداد آن‌ها از مسائل مهمی است که به ساختن فولرین‌های جدید و شمارش ایزومرهای آن‌ها منجر خواهد شد. پایداری فولرین‌ها نیز از جمله مسائلی است که قابل بیان به زبان نظریه گراف‌ها می‌باشد.

یک شاخص توپولوژیک برای یک گراف G، عددی حقیقی متناظر با G است چنان که هرگاه G و H یک‌ریخت باشند، این شاخص برای G و H مقادیر یکسانی به دست می‌دهد. دیودا اولین شیمیدانی بود که محاسبه‌ی شاخص‌های توپولوژیک فولرین‌ها را مورد توجه قرار داد که در طی سال‌های اخیر، موضوع بسیاری از تحقیقات بوده است. کاربردهای عظیم این اشیاء در فناوری‌های جدید، مطالعه روابط ریاضی حاکم بر این موجودات را بسیار موجه ساخته است.

هدف این کتاب مطالعه شاخص‌های توپولوژیک و چندجمله‌ای‌های شمارشی فولرین‌ها و و ارائه روش‌هایی است که با کمک آن می‌توان به مطالعه عمیق این اشیا پرداخت. این کتاب برای عموم علاقمندان رشته‌های ریاضی، شیمی و علوم نانو نوشته شده است. از این رو ما به صورتی عمیق وارد اثبات احکام و قضایا نشده‌ایم و صرفا روش‌هایی محاسباتی و برهان‌هایی بر اساس اشکال ارائه نموده‌ایم. خواننده علاقمند از لابلای متون می‌تواند به حدس‌های

عمیقی درباره فولرین‌ها برسد که این مهم‌ترین هدف ماست. چون این اولین کتابی است که در این زمینه انتشار می‌یابد، نویسندگان انتظار بخشش در خصوص لغزش‌های احتمالی را دارند.

علی‌رضا اشرفی، مجتبی قربانی، مریم جلالی

کاشان، پاییز ۱۳۸۸