مؤشرات زغرب الطوبولوجية المشتركة العامة لسلسلة بنزينويد سيركومكورونين

إيفان جوتمان[1]، محمد الشرفي[2]، خالد الدوه[3]، أحمد عايش[4]، عبده العامري[5]، يوسف زيرين[2]
[1]كلية العلوم، جامعة كراغويفاتش، كراغويفاتش، جمهورية صربيا.
[2]قسم الرياضيات، كلية العلوم والآداب، جامعة يلدز التقنية، إسطنبول، تركيا.
[3]قسم الرياضيات، كلية العلوم، الجامعة الإسلامية بالمدينة المنورة، المدينة المنورة، المملكة العربية السعودية
[4]قسم الرياضيات، كلية العلوم، جامعة البحرين، الصخير، مملكة البحرين.
[5]كلية الهندسة، جامعة العلوم والتكنولوجيا، صنعاء، اليمن.
[1]gutman@kg.ac.rs
[2]alsharafi205010@gmail.com
[3]aldwoah@iu.edu.sa
[4]aaayache@uob.edu.bh
[5]a.alameri2222@gmail.com
[5]yzeren@yildiz.edu.com

الملخص

يتم تمكين العديد من التطبيقات في الكيمياء من خلال نظرية الرسم البياني الكيميائي، وهو فرع من نظرية الرسم البياني. تُستخدم الكميات العددية المشتقة من الرسوم البيانية الكيميائية للجزيء، والمعروفة باسم المعلمات الطوبولوجية (المؤشرات والمؤشرات المشتركة)، لنمذجة الخواص الكيميائية والفيزيائية للجزيئات. على الرغم من أن حساب المؤشرات الطوبولوجية (topological indices) قد ساهم فيها العديد من الباحثين، إلا أن الدراسات حول حساب المؤشرات الطوبولوجية المشتركة (topological coindices) محدودة للغاية. تركز هذه الورقة على المؤشرات الطوبولوجية المشتركة تحديدا مؤشرات زغرب المشتركة العامة لسلسلة البنزينويد سيركومكورونين. يتم حساب الصيغ الخاصة بمؤشر زغرب المشترك العام الأول ومؤشر زغرب المشترك العام الثاني والحالات الخاصة لهذه السلسلة.(benzenoid circumcoronene series)

الكلمات المفتاحية: مؤشرات زغرب العامة؛ مؤشرات زغرب المشتركة العامة؛ سلسلة البنزينويد سيركومكورونين.

المقدمة

نظرية الرسم البياني هي فرع من فروع الرياضيات يهتم بشبكات النقاط المتصلة بالخطوط. كانت بدايات موضوع نظرية الرسم البياني في مسائل الرياضيات الترفيهية، لكنه تطور ليصبح مجالًا مهمًا للأبحاث الرياضية، مع تطبيقات واسعة في الكيمياء، وبحوث العمليات، والعلوم الاجتماعية، وعلوم الكمبيوتر وعلم الأحياء والإلكترونيات والشبكات وما إلى ذلك. نظرية الرسم البياني الكيميائي هي فرع طوبولوجيا الكيمياء الرياضية الذي يطبق نظرية الرسم البياني على النمذجة الرياضية للكيمياء. المعلمات الطوبولوجية (المؤشرات الطوبولوجية والمؤشرات الطوبولوجية المشتركة) هي معلمات عددية لنظرية الرسم البياني الكيميائي والتي تعد من بين أفضل التطبيقات للتعرف على الخواص الفيزيائية والتفاعلات الكيميائية والأنشطة البيولوجية. هناك عدة أنواع من المعلمات الطوبولوجية، مثل: المعلمات الطوبولوجية القائمة على الدرجة، والمعلمات الطوبولوجية القائمة على المسافة، والمختلطة. يمكن استخدام المعلمات الطوبولوجية (المؤشرات الطوبولوجية والمؤشرات الطوبولوجية المشتركة) المستمدة من نظرية الرسم البياني لنمذجة البنية الهندسية للمركبات الكيميائية والتنبؤ بخصائصها الفيزيائية والكيميائية، مثل: نقاط الغليان ونقاط الانصهار دون حسابات معقدة [1، 2]. ساهمت المؤشرات الطوبولوجية، وخاصة المؤشرات القائمة على الدرجة، بشكل كبير في الأبحاث الكيميائية والصيدلانية. لكن الدراسات حول المؤشرات الطوبولوجية المشتركة في هذا المجال محدودة للغاية [3]. في هذا البحث سوف نقوم بحساب وتحليل مؤشرات زغرب المشتركة العامة (مؤشرات زغرب المشتركة العامة الأولى ومؤشرات زغرب المشتركة العامة الثانية) لسلسلة من سلاسل البنزينويد المهمة في التطبيقات الكيميائية، تسمى سلسلة بنزينويد سيركومكورونين [4]. البنزين مركب كيميائي عضوي يتكون من ست ذرات كربون مع ذرة هيدروجين واحدة مرتبطة بكل منها. تعد سلسلة سيركومكورونين البنزينويد أحد أنواع الأنظمة البنزنويدية التي تمت مناقشتها في العديد من الدراسات السابقة، لكن هنا سندرس أنواعًا أخرى من المعلمات الطوبولوجية عليها والتي تسمى مؤشرات زغرب المشتركة العامة [5، 6، 7].

1. تمهيد

تم النظر في مؤشر زغرب الأول $M_1(\Gamma)$، ومؤشر زغرب الثاني $M_2(\Gamma)$ لأول مرة من قبل جوتمان وترياناجستيتش (Gutman, Trinajstić) في عام 1972 [8]. وتم تعريفها على النحو التالي:

$$M_1(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} (\delta_\Gamma(\mu) + \delta_\Gamma(\nu)), \quad M_2(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} \delta_\Gamma(\mu)\,\delta_\Gamma(\nu) \quad (1)$$

ابتكر راندیتش (Randić) مفهوم مؤشر الاتصال [9]، والذي يشار إليه حاليًا باسمه، وتم تعريفه على النحو التالي:

$$R_{-1/2}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} 1/\sqrt{\delta_\Gamma(\mu)\,\delta_\Gamma(\nu)}. \quad (2)$$

قدم فورتولا وجوتمان (Furtula and Gutman) مؤشر الفهرس المنسي (F-index) [10] والذي يعرف كالتالي:

$$F(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} \delta_\Gamma^2(\mu) + \delta_\Gamma^2(\nu) \quad (3)$$

العامري وآخرون (Alameri et al.) قدموا مؤشر اليمن (Y-index) [11]، والذي تم تعريفه على النحو التالي:

$$Y(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} \delta_\Gamma^3(\mu) + \delta_\Gamma^3(\nu) \quad (4)$$

شيردل وآخرون (Shirdel et al.) [12] قدموا مؤشرًا قائمًا على الدرجة، يُسمى مؤشر فائق زغرب:

$$HM(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} (\delta_\Gamma(\mu) + \delta_\Gamma(\nu))^2 \quad (5)$$

جاو وآخرون (Gao et al.) [13] قدموا مؤشرًا آخر على أساس الدرجة، سمي مؤشر فائق زغرب الثاني معرف كالتالي:

$$HM_2(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^2(\mu)\,{\delta_\Gamma}^2(\nu) \quad (6)$$

في الآونة الأخيرة، وليد وآخرون (Walid et al.) [14] قدموا مؤشرًا طبولوجيًا جديدًا، يسمى مؤشر القدس "Q-index" معرف على النحو التالي:

$$Q(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^5(\mu)\,{\delta_\Gamma}^5(\nu) \quad (7)$$

وبشكل أعم، قدم لي وتشينغ (Li and Zheng) [15] تعميمًا لمؤشر زغرب الأول على النحو التالي:

$$M_1^\alpha(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} [\delta_\Gamma^\alpha(\mu) + \delta_\Gamma^\alpha(\nu)] \quad (8)$$

كما تم تعريف مؤشر زغرب الثاني المعمم [16، 17] على النحو التالي:

$$M_2^\alpha(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} [\delta_\Gamma(\mu)\,\delta_\Gamma(\nu)]^\alpha. \quad (9)$$

من ناحية أخرى، قدم دوسليتش (Došlić) مؤشرات زغرب المشتركة أثناء حساب كثيرات حدود وينر الموزونة لبعض الرسوم البيانية المركبة [18]. وتم تعريفها على النحو التالي:

$$\overline{M}_1(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma(\mu) + \delta_\Gamma(\nu)], \quad (10)$$

$$\overline{M}_2(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma(\mu)\delta_\Gamma(\nu)] \quad (11)$$

دي وآخرون (De et al.) [19] قدموا المؤشر المنسي المشترك (F-coindex) ، والذي تم تعريفه على النحو التالي.

$$\overline{F}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma^2(\mu) + \delta_\Gamma^2(\nu)$$

أيضا العامري وآخرون (Alameri et al.) [20] قدموا

مؤشـــر اليمن المشـــترك (Y-coindex) الذي تم تعريفه على النحو التالي:

$$\overline{Y}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma^3(\mu) + \delta_\Gamma^3(\nu)]$$

في الآونة الأخيرة، تحديداً في عام 2020، قدم بيلاي ووانغ (Belay and Wang) [21] مؤشـــر زغرب الأول المشـــترك المعمم والذي تم تعريفه على النحو التالي:

$$\overline{M_1^\alpha}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma^\alpha(\mu) + \delta_\Gamma^\alpha(\nu)]$$

كما قدم فيلكان وآخرون (Veylaki, et al) [22] مؤشـــر زغرب الأول الفائق المشترك وتم تعريفه كالتالي:

$$\overline{HM}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} [\delta_\Gamma(\mu) + \delta_\Gamma(\nu)]^2, \quad (12)$$

العامري (Alameri) [23] عرف مؤشر زغرب الثاني الفائق المشترك على النحو التالي:

$$\overline{HM_2}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^2(\mu)\,{\delta_\Gamma}^2(\nu) \quad (13)$$

وكذلك وليد وآخرون (Walid et al.) [14] قدموا مؤشـــر القدس المشترك (Q-coindex) الذي تم تعريفه كالتالي:

$$\overline{Q}(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^3(\mu)\,{\delta_\Gamma}^3(\nu) \quad (14)$$

اقتراح 1.2: ([21]) لرســم بيـاني متصـــل Γ حيث $n = |V(\Gamma)|, m = |E(\Gamma)|, \alpha \in R$ ، مؤشـــر زغرب الأول المشترك المعمم يعطى كما يلي:

$$\overline{M_1^\alpha}(\Gamma) = (n-1)M_1^{\alpha-1}(\Gamma) - M_1^\alpha(\Gamma) \quad (15)$$

من السهل أن نرى أن مؤشر زغرب الأول المشترك، والمؤشر المنسي المشترك، ومؤشر اليمن المشترك حالات خاصة لمؤشر زغرب الأول المشـــترك المعمم، عندما تكون α=1,2,3 على التوالي. الصـــيغ التالية توضـــح العلاقة بين مؤشـــرات زغرب الأول والمنســـي واليمن والمؤشـــرات المشـــتركة لها [24، 19، 20]:

$$\overline{M}_1(\Gamma) = 2m(n-1) - M_1(\Gamma), \quad (16)$$

$$\overline{F}(\Gamma) = (n-1)M_1(\Gamma) - F(\Gamma), \quad (17)$$

$$\overline{Y}(\Gamma) = (n-1)F(\Gamma) - Y(\Gamma) \quad (18)$$

من الأهمية بمكان في هذا القسم تقديم مؤشـر زغرب المشـترك العام الثاني واســتخلاص صــيغته العامة ومعرفة المؤشــرات الطوبولوجية التي تمثل حالات خاصة منه.

اقتراح 2.2: لرسم بياني متصل Γ حيث $n = |V(\Gamma)|, m = |E(\Gamma)|, \alpha \in R$ ، مؤشر زغرب الثاني المشترك المعمم يعطى كما يلي:

$$\overline{M_2^\alpha}(\Gamma) = \frac{1}{2}[(M_1^\alpha\Gamma)^2 - M_1^{2\alpha-1}(\Gamma)] - M_2^\alpha(\Gamma), \quad (19)$$

الإثبات:

كما تم حســـاب مؤشـــر زغرب الفائق المشـــترك الأول [25]، ومؤشر زغرب الفائق المشترك الثاني [26]، يمكننا أن نكتب:

$$\overline{M_2^\alpha}(\Gamma) + M_2^\alpha(\Gamma) = (\sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} + \sum_{\mu\nu\notin E(\Gamma)})({\delta_\Gamma}^\alpha(\mu)\,{\delta_\Gamma}^\alpha(\nu))$$

$$= \frac{1}{2}[\sum_{\mu\in V(\Gamma)} \sum_{\nu\in V(\Gamma)} ({\delta_\Gamma}^\alpha(\mu)\,{\delta_\Gamma}^\alpha(\nu))] - \frac{1}{2}[\sum_{\mu=\nu\in V(\Gamma)} ({\delta_\Gamma}^\alpha(\mu)\,{\delta_\Gamma}^\alpha(\nu))]$$

$$= \frac{1}{2}[(\sum_{\mu\in V(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^\alpha(\mu))(\sum_{\nu\in V(\Gamma)} {\delta_\Gamma}^\alpha(\nu))] - \frac{1}{2}[\sum_{\nu\in V(\Gamma)} ({\delta_\Gamma}^{2\alpha}(\nu))]$$

$$= \frac{1}{2}[M_1^{\alpha-1}(\Gamma)M_1^{\alpha-1}(\Gamma) - M_1^{2\alpha-1}(\Gamma)] = \frac{1}{2}[(M_1^{\alpha-1}\Gamma)^2 - M_1^{2\alpha-1}(\Gamma)]$$

حيث:

$$M_1^{\alpha-1}(\Gamma) = \sum_{\nu\in V(\Gamma)} \delta_\Gamma^\alpha(\nu), \quad M_1^{2\alpha-1}(\Gamma) = \sum_{\nu\in V(\Gamma)} \delta_\Gamma^{2\alpha}(\nu),$$

وبالتالي فإن:

$$\overline{M_2^\alpha}(\Gamma) = \frac{1}{2}[(M_1^{\alpha-1}\Gamma)^2 - M_1^{2\alpha-1}(\Gamma)] - M_2^\alpha(\Gamma).$$

نلاحظ أن مؤشر زغرب المشترك الثاني، ومؤشر زغرب الفائق المشـترك الثاني، ومؤشـر القدس المشـترك هي حالات خاصـة لمؤشـر زغرب المشـترك العام الثاني، عندما تكون α=1,2,3 على التوالي. الصـيغ التالية توضـح العلاقة بين مؤشـر زغرب الثاني، ومؤشر زغرب الفائق الثاني، ومؤشر القدس والمؤشرات المشتركة لها [24، 23، 14]:

$$\overline{M}_2(\Gamma) = 2m^2 - \frac{1}{2}M_1(\Gamma) - M_2(\Gamma), \quad (20)$$

$$\overline{HM_2}(\Gamma) = \frac{1}{2}M_1^2(\Gamma) - \frac{1}{2}Y(\Gamma) - HM_2(\Gamma). \quad (21)$$

$$\overline{Q}(\Gamma) = \frac{1}{2}F^2(\Gamma) - \frac{1}{2}G(\Gamma) - HM_2(\Gamma). \quad (22)$$

حيث $G(\Gamma)$ هو مؤشر طوبولوجي معرف على النحو التالي [14]:

$G(\Gamma) = \sum_{\mu\nu\in E(\Gamma)} \delta_\Gamma^5(\mu) + \delta_\Gamma^5(\nu)$

2. مؤشرات زغرب العامة ومؤشراتها المشتركة العامة لسلسلة البنزينويد سيركورونين

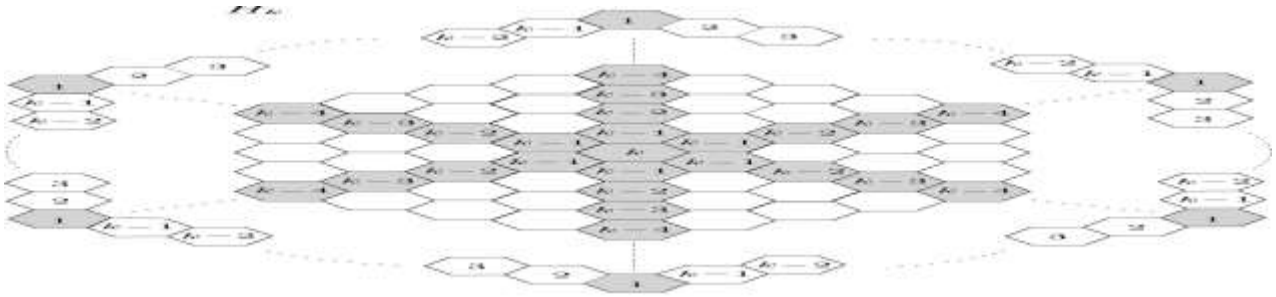
نظريـة 1.3 لنفترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة سيركومكورونين لأنظمة البنزينويد (انظر الشكل 1)، يتم تقسيم مجموعات الرؤوس والحواف لـــ H_k إلى مجموعتي رؤوس وثلاث مجموعات حواف بناءً على درجة القمم النهائية، على التوالي، كما هو موضح في [27]:

$$V_1(H_k) = \{\mu \in V(H_k): \delta(\mu) = 2\},$$
$$V_2(H_k) = \{\nu \in V(H_k): \delta(\nu) = 3\},$$
$$E_1(H_k) = \{e = \mu\nu \in E(H_k): \delta(\mu) = \delta(\nu) = 2\}, \quad E_2(H_k) = \{e = \mu\nu \in E(H_k): \delta(\mu) = 2, \delta(\nu) = 3\}, \quad E_3(H_k) = \{e = \mu\nu \in E(H_k): \delta(\mu) = \delta(\nu) = 3\}$$

تقسيمات مجموعات الرؤوس والحواف $V(H_k)$ $E(H_k)$, موضحة في (الجدول 1.):

الجدول 1: تقسيمات الرأس والحافة لـH_k

تقسيمات الرأس	V_1	V_2
عددها	$6k$	$6k(k-1)$
تقسيمات الحواف	E_1	E_2
عددها	6	$12(k-1)$



الشكل 1: أنظمة البنزنويد السيركومكورونين

نظرية 2.3 لنفترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة سيركومكورونين لأنظمة البنزينويد. فإن مؤشر زغرب العام الأول لـــ H_k يعطي كما يلي:

$$M_1^\alpha(H_k) = 6k(k-1)3^{\alpha+1} + 6k2^{\alpha+1} \qquad (23)$$

الإثبات:

من المعادلة 8 والنظرية 1.3، لدينا:

$$\begin{aligned}
&M_1^\alpha(H_k)\\
&= \sum_{\mu\nu\in E(H_k)} [\delta_{H_k}^\alpha(\mu) + \delta_{H_k}^\alpha(\nu)]\\
&= \sum_{\mu\nu\in E_1} [\delta^\alpha\mu + \delta^\alpha\nu] + \sum_{\mu\nu\in E_2} [\delta^\alpha\mu + \delta^\alpha\nu] + \sum_{\mu\nu\in E_3} [\delta^\alpha\mu + \delta^\alpha\nu]\\
&= |E_1|[2^\alpha + 2^\alpha] + |E_2|[2^\alpha + 3^\alpha] + |E_3|[3^\alpha + 3^\alpha]\\
&= (6)[2^\alpha + 2^\alpha] + 12(k-1)[2^\alpha + 3^\alpha] + (9k^2 - 15k + 6)[3^\alpha + 3^\alpha]\\
&= 6k(k-1)3^{\alpha+1} + 6k2^{\alpha+1}.
\end{aligned}$$

نتيجة 3.3 لنفترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة البنزنويد سيركومكورونين. فإن مؤشر زغرب المشترك العام الأول لـ H_k يعطى على النحو التالي:

$$\overline{M_1^\alpha}(H_k) = 4k(k-1)(3k^2-2)3^{\alpha+1} + 9k(2k^2-1)2^{\alpha+1} \qquad (24)$$

الإثبات:

من خلال الاقتراح 1.2، والنظرية 1.3، والنظرية 2.3، لدينا

$$\begin{aligned}
&\overline{M_1^\alpha}(H_k)\\
&= (n-1)M_1^{\alpha-1}(H_k) - M_1^\alpha(H_k)
\end{aligned}$$

$$= (6k^2-1)[6k(k-1)3^{\alpha}+6k2^{\alpha}]-[6k(k-1)3^{\alpha+1}+6k2^{\alpha+1}]$$
$$= 4k(k-1)(3k^2-2)3^{\alpha+1}+9k(2k^2-1)2^{\alpha+1}$$

نتيجة 4.3 لنفترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة البنزنويد سيركومكورونين. فإن مؤشر زغرب الأول والمؤشر المنسي ومؤشر اليمن ومؤشراتهما المشتركة لـ H_k تعطى على النحو التالي:

$$M_1(H_k) = M_1^1(H_k) = 54k^2-30k, \quad (25)$$
$$F(H_k) = M_1^2(H_k) = 162k^2-144k, \quad (26)$$
$$Y(H_k) = M_1^3(H_k) = 486k^2-390k, \quad (27)$$
$$\overline{M_1}(H_k) = \overline{M_1^1}(H_k) = 108k^4-36k^3-72k^2+36k, \quad (28)$$
$$\overline{F}(H_k) = \overline{M_1^2}(H_k) = 324k^4-108k^3-216k^2+144k, \quad (29)$$
$$\overline{Y}(H_k) = \overline{M_1^3}(H_k) = 972k^4-684k^3-648k^2+504k. \quad (30)$$

الإثبات: من النظرية 2.3 والنتيجة 3.3، نحصل مباشرة على النتائج المطلوبة كحالات خاصة للصيغ الخاصة بمؤشر زغرب العام الأول ومؤشره المشترك، عندما α=-1/2,1,2، على التوالي.

نظرية 5.3 افترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة البنزنويد سيركومكورونين. فإن مؤشر زغرب العام الثاني لـــ H_k يعطى بالصيغة التالية:

$$M_2^{\alpha}(H_k) = 9^{\alpha}[9k^2-15k+6]+6^{\alpha}[12k-12]+4^{\alpha}[6] \quad (31)$$

الإثبات: من المعادلة 9 والنظرية 1.3، لدينا:

$$M_2^{\alpha}(H_k)$$
$$= \sum_{\mu\nu\in E(H_k)}[\delta_{H_k}^{\alpha}(\mu)\delta_{H_k}^{\alpha}(\nu)]$$
$$= \sum_{\mu\nu\in E_1}[\delta_{H_k}^{\alpha}(\mu)\delta_{H_k}^{\alpha}(\nu)]+\sum_{\mu\nu\in E_2}[\delta_{H_k}^{\alpha}(\mu)\delta_{H_k}^{\alpha}(\nu)]+\sum_{\mu\nu\in E_3}[\delta_{H_k}^{\alpha}(\mu)\delta_{H_k}^{\alpha}(\nu)]$$
$$= |E_1|[2^{\alpha}\quad 2^{\alpha}]+|E_2|[2^{\alpha}\quad 3^{\alpha}]+|E_3|[3^{\alpha}\quad 3^{\alpha}]$$
$$= (6)[2^{\alpha}\quad 2^{\alpha}]+12(k-1)[2^{\alpha}\quad 3^{\alpha}]+(9k^2-15k+6)[3^{\alpha}\quad 3^{\alpha}]$$
$$= 9^{\alpha}[9k^2-15k+6]+6^{\alpha}[12k-12]+4^{\alpha}[6].$$

نتيجة 6.3 لنفترض أن H_k هو المستوى k في سلسلة البنزنويد سيركومكورونين. فإن مؤشر زغرب المشترك الثاني المعمم لـ H_k يعطى على النحو التالي:

$$\overline{M_2^{\alpha}}(H_k) = 9^{\alpha}[18k^4-36k^3+6k^2+18k-6]$$
$$+6^{\alpha}[36k^3-36k^2-12k+12]+4^{\alpha}[18k^2-3k-6] \quad (32)$$

الإثبات: من الاقتراح 2.2، النظرية 1.3، النظرية 2.3، والنظرية 5.3، لدينا

$$\overline{M_2^{\alpha}}(H_k)$$
$$= \frac{1}{2}[(M_1^{\alpha-1}H_k)^2-M_1^{2\alpha-1}(H_k)]-M_2^{\alpha}(H_k).$$
$$= \frac{1}{2}[6k(k-1)3^{\alpha}+6k2^{\alpha}]^2-\frac{1}{2}[6k(k-1)3^{2\alpha}+6k2^{2\alpha}]$$
$$-9^{\alpha}[9k^2-15k+6]+6^{\alpha}[12k-12]+4^{\alpha}[6]$$
$$= 9^{\alpha}[18k^4-36k^3+6k^2+18k-6]$$
$$+6^{\alpha}[36k^3-36k^2-12k+12]+4^{\alpha}[18k^2-3k-6].$$

نتيجة 7.3 لنفترض أن H_k هي سلسلة بنزينويد سيركومكورونين، فإن مؤشر زغرب الثاني، والمؤشر الفائق زغرب الثاني، ومؤشر القدس، مؤشر اتهما المشتركة لـ H_k تعطى على النحو التالي:

$$M_2(H_k) = M_2^1(H_k) = 81k^2-63k+6, \quad (33)$$
$$HM_2(H_k) = M_2^2(H_k) = 729k^2-783k+150, \quad (34)$$
$$Q(H_k) = M_2^3(H_k) = 6561k^2-8343k+2166, \quad (35)$$
$$\overline{M_2}(H_k) = \overline{M_2^1}(H_k) = 162k^4-108k^3-90k^2+78k-6, \quad (36)$$
$$\overline{HM_2}(H_k) = \overline{M_2^2}(H_k) = 1458k^4-1620k^3-522k^2+978k-150, \quad (37)$$

$$\overline{Q}(H_k) = \overline{M_2^3}(H_k) = 13122k^4 - 18468k^3 - 2250k^2 + 10338k - 2166. \quad (38)$$

الإثبات: من النظرية. 5.3 والنتيجة 6.3، نحصل مباشرة على النتائج المطلوبة كحالات خاصة للصيغ الخاصة بمؤشر زغرب العام الثاني ومؤشره المشترك، عندما α=-1/2,1,2، على التوالي.

الاستنتاجات

في هذه الدراسة، قدمنا صيغة ل مؤشر زغرب المشترك العام الثاني وقمنا بدراسة واصفات زغرب العامة (المؤشرات والمؤشرات المشتركة) لسلسلة البنزينويد سيركومكورونين وحالاتها الخاصة. كما تم اشتقاق الصيغ الخاصة بمؤشر زغرب المشترك العام الأول ومؤشر زغرب المشترك العام الثاني والحالات الخاصة لها.

المراجع

[1] Gutman I., Ruščić B., Trinajstić N., Wilcox C. F., (1975). Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes, J. Chem. Phys. 62, pp. 3399-3405.

[2] Das K. C., Gutman I., Furtula B., (2011). Survey on geometric-arithmetic indices of graphs, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 65(3), pp. 595–644.

[3] Ayache A., Alameri A., Alsharafi M., Ahmed H., (2021). The second hyper-Zagreb coindex of chemical graphs and some applications, Journal of Chemistry, 2021, #3687533,. https://doi.org/10.1155/2021/3687533

[4] Gutman I., Cyvin S. J., 1989. Introduction to the Theory of Benzenoid Hydrocarbons, Springer, Berlin.

[5] Alsharafi M., Akar M., Zeren Y., Alameri A., (2023). Degree-based topological descriptors of hexaphenylbenzene molecule graphs, Polyc. Arom. Comp. https://doi.org/10.1080/10406638.2023.2190133

[6] Redžepović I., et al., (2023). Partition of topological indices of benzenoid hydrocarbons into ring contributions, Int. J. Quantum Chem. 123(12), e27108. https://doi.org/10.1002/qua.27108

[7] Alsharafi M., Alameri A., Zeren Y., (2024). The Y-index and coindex of VC5C7[p,q] and HC5C7[p,q] nanotubes, TWMS J. Appl. Eng. Math. 4(2), pp. 433-445.

[8] Gutman I., Trinajstić N., (1972). Graph theory and molecular orbitals. Total π- electron energy of alternant hydrocarbons, Chem. Phys. Lett. 17. pp. 535-538.

[9] Randić M., (2008). On history of the Randić index and emerging hostility toward chemical graph theory, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 59, pp. 5–124.

[10] Furtula B., Gutman I., (2015). A forgotten topological index, J. Math. Chem. 53(4), pp. 1184-1190.

[11] Alameri A., Al-Naggar N., Alromaimah M., Alsharafi M., (2020). Y-index of some graph operations, International Journal of Applied Engineering Research (IJAER), 15(2) pp. 173-179.

[12] Shirdel G., Sayadi A. M., (2013). The hyper-Zagreb index of graph operations, Iran. J. Math. Chem. 4(2), pp. 213-220.

[13] Wei G., et al., (2016). On the first and second Zagreb and first and second hyper-Zagreb indices of carbon nanocones $CNCk[n]$, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 13(10), pp. 7475-7482.

[14] Yousef, W., Abdu Alameri, A., Alsharafi, M., Al-Naggar, N., Al-Fuhaid, B., (2024). Topological and hyper topological coindices of benzenoid circumcoronene series, Baghdad Science Journal, 22(4):1-14. http://dx.doi.org/10.21123/bsj.2024.10588

[15] Li X., Zheng J., (2005). A unified approach to the extremal trees for different indices, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 54, pp. 195-208.

[16] Ayache A., Gutman I., Alameri A., Ghallab

A., (2023). General Zagreb indices of composite graphs, El. J. Math. 6, pp. 66-81. http://dx.doi.org/10.47443/ejm.2023.048

[17] Alameri A., Gutman I., Kulli V., Ayache A., Alsharafi M., (2024). Chemical applications on general Zagreb indices of composite graphs, International Journal Of Mathematics And Computer Research, 12(3), pp. 4114-4118. https://doi.org/10.47191/ijmcr/v12i3.06

[18] Došlić, T. (2008). Vertex-weighted Wiener polynomials for composite graphs. Ars Math. Contemp. 1(1), pp. 66-80.

[19] De, N., Nayeem, S. M. A., Pal, A. (2016). The F-coindex of some graph operations. SpringerPlus, 5,

[20] Alameri, A., Al-Rumaima, M., Almazah, M. (2020). Y-coindex of graph operations and its applications of molecular descriptors. J. Mol. Struct. 1221, #128754.

[21] Belay, M. B., Wang, C. (2020). The first general Zagreb coindex of graph operations. Applied Mathematics and Nonlinear Sciences, 5(2), pp. 109-120.

[22] Veylaki, M., Nikmehr, M. J., Tavallaee, H. A. (2016). The third and hyper-Zagreb coindices of some graph operations. J. Appl. Math. Comput. 50, pp. 315-325.

[23] Alameri, A. (2021). Second hyper-zagreb index of titania nanotubes and their applications. IEEE Access, 9, 9567-9571.

[24] Ashrafi, A. R., Došlić T., Hamzeh, A. (2010). The Zagreb coindices of graph operations, Discrete Appl. Math. 158(15), pp. 1571-1578.

[25] Gutman, I. (2017). On hyper-Zagreb index and coindex, Bull. Acad. Serbe Sci. Arts, (42), pp. 1-8.

[26] Ayache, A., Alameri, A., Alsharafi, M., Ahmed, H. (2021). The second hyper-Zagreb coindex of chemical graphs and some applications, Journal of Chemistry, 2021, #3687533. https://doi.org/10.1155/2021/3687533

[27] Farahani, M. R. (2013). Zagreb index, Zagreb polynomial of circumcoronene series of benzenoid, Advances in Materials and Corrosion, 2(1), pp. 16-19.