فاصله در گراف‌های شیمیایی

بهزاد منوچهریان
عضو هیأت علمی جهاد دانشگاهی واحد تهران

مقدمه

هرجا تعدادی رأس که برخی از آن‌ها به یکدیگر وصل شده باشند می‌بینیم، می‌گوییم این شکل یک گراف است و همین خصوصیت به ظاهر ساده سر منشأ ایجاد نظریه گراف و پرکاربرد بودن آن می‌باشد.
ده‌ها سال است که نظریه گراف با ورود به دیگر رشته‌ها نظیر شیمی، نقش ایفا می‌کند.
در این نوشته سعی شده به گوشه‌ای از این نقش‌آفرینی اشاره شود و این عرصه چه وسیع است.

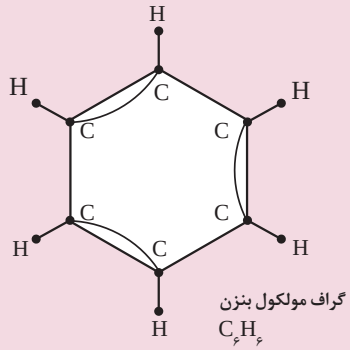
گراف شیمیایی گرافی است که رأس‌های آن (معمولاً) اتم‌ها هستند و یال‌های آن پیوندهایی هستند که بین اتم‌ها برقرار هستند. چنین گرافی را **گراف مولکولی** هم می‌نامند.

بسیاری از ریاضی‌دانان، و نیز شیمی‌دانان، نمی‌دانند که منشأ اصطلاح «گراف» از شیمی است.

گرچه اولین بار سیلوستر[1] ریاضی‌دان انگلیسی در قرن نوزدهم میلادی، اصطلاح گراف را برای نامیدن این مفهوم ریاضی به‌کار برد، اما او این کلمه را از یک اصطلاح رایج شیمی آن زمان وام گرفته بود.

گراف‌های شیمیایی اولین بار در نیمه دوم قرن هیجدهم میلادی پدید آمدند و اکنون برای مقاصد گوناگونی در تمامی شاخه‌های اصلی شیمی به‌کار می‌روند.

اولین گراف شیمیایی که به‌روشنی به همین عنوان قابل شناسایی است، توسط کولن[2] شیمی‌دان اسکاتلندی در سال ۱۷۸۵ میلادی رسم شد.



گراف مولکول بنزن
C_6H_6

اندیس توپولوژیک[3]

این اندیس عددی از پایاهای گراف است و به نحوی بیانگر اندازه و شکل مولکول مربوط نیز می‌باشد.

اولین اندیس توپولوژیک در شیمی توسط هارولد وینر[4] شیمی‌دان آمریکایی، به منظور مطالعهٔ نقطهٔ‌جوش پارافین در سال ۱۹۴۷ میلادی مطرح شد. او نقطه‌جوش پارافین را با عبارتی خطی که این اندیس در آن ظاهر می‌شود، تخمین زد و نتایج آزمایشگاهی هم موافق پیش‌بینی و محاسبات او درآمد.

اندیس وینر یک گراف برابر مجموع فواصل دوبه‌دوی تمامی رأس‌های آن گراف است. بر این اساس داریم:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\}\subseteq V(G)} d_G(u,v) = \frac{1}{2}\sum_{v\in V(G)} d_G(v)$$

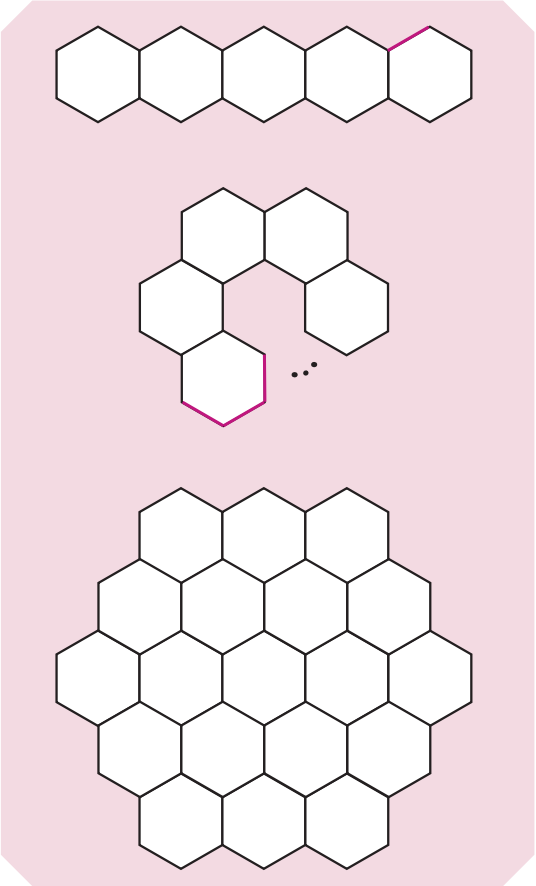
در اینجا $d_G(u,v)$ فاصله دو رأس u و v در گراف G است و از این پس به اختصار می‌نویسیم $d(u,v)$.

این تعریف از هوسویا[5] شیمی‌دان معاصر ژاپنی است که آن را در سال ۱۹۷۱ میلادی ارائه داد و آن را «اندیس وینر» نام نهاد. به همین جهت برخی او را «پدر شیمی ریاضی» لقب داده‌اند.

از آن پس اندیس‌های توپولوژیک گوناگونی برای مطالعه خواص و پیش‌بینی در مورد عملکرد مولکول‌ها ابداع شدند که شیمی‌دانان و ریاضی‌دانان بر روی آن‌ها مطالعه می‌کنند و هر ساله کتب و مقالات بسیار متنوعی در این موضوعات نگاشته می‌شوند.

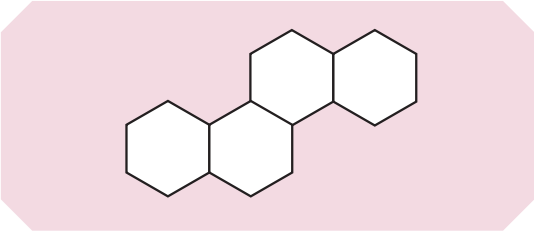
از آنجا که در این مطالعات مشخص شده میزان همبستگی اندیس وینر با خواص مولکول‌ها بیش از سایر اندیس‌هاست، هنوز هم در این مطالعات به این اندیس توجه ویژه‌ای می‌شود.

گـراف بسـیاری از مولکول‌هایـی که در شـیمی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند از دورها تشـکیل شـده است. در این گراف‌هـا دورهـا در حالی‌که دوبه‌دو در یک یال مشـترک هستند، به‌صورت‌های خطی، شبکه‌ای و یا دوری به یکدیگر چسبیده‌اند.



گروه عظیمی از مولکول‌ها که در شیمی نفت و مشتقات آن و همچنین در نانوشیمی مطرح هستند و مورد مطالعه قرار می‌گیرند «هیدروکربن‌های بنزنویید»[6] هستند. «بنزنویید» به معنی «شبیه بنزن» است و چنین نامی به‌خاطر ساختاری اسـت که از مولکول‌های شبیه بنزن تشکیل شده است. در سـاختار این مولکول‌ها، اسکلت اصلی از کربن تشکیل شده که توسط اتم‌های هیدروژن محاصره شده است.

ایـن هیدروکربن‌هـا از دو نظر اهمیت فراوانـی دارند. اول این‌که ماده اولیه بسـیاری از صنایع شـیمیایی هستند و برای سـاخت موادی چون انواع پلاستیک به‌کار می‌روند. دیگر این‌که از آلاینده‌های خطرناک محیط‌زیست محسوب می‌شـوند. این مولکول‌ها جزء خانواده بزرگ «سیستم‌های شش‌ضلعی» هستند.



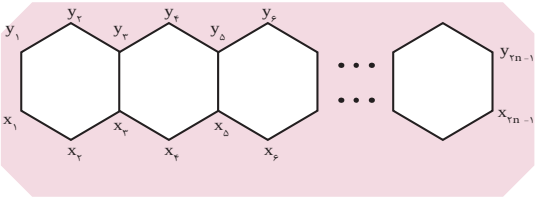
سیستم شش ضلعی وابسته به مولکول بنزوپیرن

این ترکیب بخش کارسینوژنی دود تنباکو است.

یک «سیسـتم شـش‌ضلعی[7]» گرافی همبند، مسطح و فاقد رأس برشی است که تمام وجوه داخلی‌اش C_6 هستند. یادآوری می‌کنیم که رأس برشی رأسی از گراف است که با حذف آن گراف ناهمبند می‌شود.

اندیس وینر یک زنجیره خطی بنزنوییدی

یک زنجیـره خطی بنزنوییـدی به طـول n را در نظر می‌گیریـم و آن را L_n می‌نامیم. با نام‌گذاری رئوس زیگزاگ بـالا و زیگزاگ پایین ایـن زنجیره، ملاحظـه می‌کنیم که اندیس وینر L_n از این فرمول به‌دست خواهد آمد:



$$W(L_n)=\sum_{\{u,v\}\subseteq X} d(u,v)$$
$$=\sum_{\{u,v\}\subseteq Y} d(u,v)+\sum_{\substack{u\in X\\ v\in Y}} d(u,v)$$
$$X=\{x_1,x_2,\dots,x_{2n+1}\},\ Y=\{y_1,y_2,\dots,y_{2n+1}\}$$

اما ملاحظه می‌کنیم که داریم:

$$\sum_{\{u,v\}\subseteq X} d(u,v)=\sum_{\{u,v\}\subseteq Y} d(u,v)=\sum_{i=1}^{2n}\sum_{j=i+1}^{2n+1}(j-i)$$

$$\sum_{\substack{u\in X\\ v\in Y}} d(u,v)=\sum_{i=1}^{2n+1}\sum_{j=1}^{i}(i-j+1)$$
$$+\sum_{i=1}^{2n}\sum_{j=i+1}^{2n+1}(j-i+1)+2n$$

که پس از محاسبه و تلخیص خواهیم داشت:

$$W(L_n)=\frac{16}{3}n^3+12n^2+\frac{26}{3}n+1$$

حتمـاً توجه دارید که حاصل ایـن عبارت به ازای هر n صحیح، عددی صحیح است.

بسیاری از ریاضی‌دانان و نیز شیمی‌دانان نمی‌دانند که منشأ اصطلاح «گراف» از شیمی است

پی‌نوشت:

1. J.J. Sylvester (1814-1897)
2. Cullen (1867-1948)
3. Topological Index
4. H. Wiener (1924-1998)
5. H. Hosoya (1936-)
6. bezenoidal hydrocarbons
7. Hexagonal system

منابع:

1. Andrey A. Dobrynin, Ivan Gutman, Sandi Klavzar, Petra Zigert, 'Wiener Index of hexagonal systems', Acta Applicandae Mathematicae 72, 247-294, 2002.
2. Damir Vukičević, Nenad Trinajstić, 'Wiener Indices of benzenoid graphs', Bulletin of Chemists and Technologists of Macedonia, vol. 23, No.2, 113-129, 2004.
3. Ivan Gutman, Igor Zenkevich, 'Wiener Index and vibrational energy', Zeitschrift f ür Naturforshung, vol.57a, 2002.