

几类图的原子键和连通性(ABS)指标

阿丽米热·吐尔洪

喀什大学数学与统计学院, 新疆 喀什

收稿日期: 2026年9月17日; 录用日期: 2026年10月11日; 发布日期: 2026年10月20日

摘要

原子键连通性(ABC)指标与和连通性(SC)指标属于连通性指标的变体类, Ali等人将SC指标和ABC指标的核心思想结合起来提出了一种新的分子拓扑指标, 称原子键和连通性(ABS)指标。图 G 的原子键和连通性指标表示为 $ABS(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left(1 - 2(d_u + d_v)^{-1}\right)^{1/2}$, 其中 d_u 为图 G 中顶点 u 的度数。本文主要讨论格子图、锯齿型纳米管 $TUHC_6[2p, q]$ 、扶手椅型纳米管 $TUVC_6[2p, q]$ 、硅酸盐链 CS_n 、 n 长的 K_n 链、直链 L_n 、锯齿链 Z_n 、双直链 $L_{2 \times n}$ 、双锯齿链 $Z_{2 \times n}$ 等化学图以及几类仙人掌链和一些特殊图的ABS指标。

关键词

原子键和连通性指标, 格子图, 化学图, 仙人掌链

Atom-Bond Sum-Connectivity (ABS) Index of Some Graphs

Alimire Tuerhong

College of Mathematics and Statistics, Kashi University, Kashgar Xinjiang

Received: September 17, 2026; accepted: October 11, 2026; published: October 20, 2026

Abstract

Atom-bond connectivity (ABC) index and sum-connectivity (SC) index belong to the variant class of connectivity index, Ali et al. introduced a new molecular topological index called atom-bond sum-connectivity (ABS) index by combining the core ideas of SC index and ABC index. The Atom-bond sum-connectivity index of a graph G is $ABS(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left(1 - 2(d_u + d_v)^{-1}\right)^{1/2}$, where d_u is the degree of the vertex u in the graph G . In this paper, we mainly discuss the ABS indices of the following

chemical graphs: grid graphs, zigzag polyhex nanotube $TUHC_6[2p, q]$, armchair polyhex nanotube $TUVC_6[2p, q]$, silicate chain CS_n , chain K_n , straight chain L_n , zigzag chain Z_n , double straight chain $L_{2 \times n}$, double zigzag chain $Z_{2 \times n}$, several types of cactus chains and ABS index of some special graphs.

Keywords

Atom-Bond Sum-Connectivity Index, Grid Graph, Chemical Graph, Cactus Chain

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在本文中图 G 是具有顶点集 $V(G)$ 和边集 $E(G)$ 的简单图, 记图 $G = (V(G), E(G))$ 。图 G 中, 边数记为 $e(G)$, 点数(阶)记为 $v(G)$, Δ_G 表示图 G 的最大度, δ_G 表示图 G 的最小度。 d_{x_i} 表示点 x_i 在图 G 中的度数。 C_n 表示 n 阶的圈, P_n 表示 n 阶的路, K_n 表示 n 阶的完全图, $K_{m,n}$ 为两个部分的阶分别为 m 和 n 的完全二部图。本文所要研究的其他图的定义将在每一章前展开说明。

化学图(分子图)是与化合物结构有关的简单图, 它的每个点代表对应化合物一个原子, 它的边代表原子间的键。在化学图论中, 与分子图论有关的图不变量称为拓扑指标, 拓扑指标是从图的结构中推导出来的数值参数, 这个参数对于建立分子化合物的结构和物理化学性质之间的相关性具有重要的作用。目前已有各种基于顶点度的图不变量被广泛介绍和研究[1]。

化学图(分子图)的分支指标(也称为连通性指标或 Randić 指标) [1] 定义为

$$R(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_u d_v}}。$$

该指标是由 Randić 在 20 世纪 70 年代中期提出来的, 连通性指标是化学图论中研究最多、应用最频繁的拓扑指标之一[2]。

由于连通性指标的成功, 文献中引入了许多该指标的修改版本。连通性指标修改版本有原子键连通性(ABC)指标[3]与和连通性(SC)指标[4]。它们定义为

$$ABC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d_u + d_v - 2}{d_u d_v}};$$

$$SC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d_u + d_v}}。$$

近年来, Ali 等人将 SC 指标和 ABC 指标的核心思想结合起来提出了一个新的指标, 称原子键和连通性(ABS)指标[5]。图的原子键和连通性(ABS)指标定义为

$$ABS(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{1 - \frac{2}{d_u + d_v}}。$$

在文献[5]中他们给出了在所有(分子)树类和给定阶的一般图上 ABS 指标极值的图, 并且证明了(分子)

图 G 的 ABC 指标的一个性质也同样适用于 ABS 指标；他们在文献[6]得出了单圈图的类似结果，也研究了 ABS 指标的化学适用性；Alraqad 等人在文献[7]提供了所有具有固定垂点数的树中 ABS 指标值最小的树，还研究了在具有固定阶和固定垂点数的所有树类中确定具有最小 ABS 指标的图的问题，并给出部分解。

在本文中将要讨论几类图的 ABS 指标，ABS 指标与图的顶点度有着直接的联系，根据所要研究的图的结构特点，可以先通过观察一种图顶点较少的情况，再把它的顶点特征推广到任意顶点数的情况，给出对应图边集的划分，最后给出准确的指标值。相较于 ABC 指标、SC 指标等传统拓扑指标，ABS 指标更能捕捉各类图的各项特性，在刻画纳米结构局部拓扑变化上具备独特优势。本文选取纳米管、六角格子图等图类作为研究对象，该类图广泛用于模拟碳纳米材料、分子晶体的拓扑结构，因此研究其 ABS 指标具有重要的应用价值。

引理 1 (1) n 阶路 P_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_n) = \begin{cases} 0, & n = 2 \\ \frac{n-3}{2}\sqrt{2} + \frac{2}{3}\sqrt{3}, & n \geq 3 \end{cases};$$

(2) n 阶圈 C_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_n) = \frac{n}{2}\sqrt{2};$$

(3) n 阶完全图 K_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(K_n) = \frac{n}{2}\sqrt{n^2 - 3n + 2};$$

(4) 若图 G 是 n 阶的 k -正则图，则 G 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(G) = \frac{n}{2}\sqrt{k^2 - k};$$

(5) 完全二部图 $K_{m,n}$ ($1 \leq m \leq n, n \geq 2$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(K_{m,n}) = \frac{mn}{m+n}\sqrt{(m+n-2)(m+n)}.$$

2. 格子图的 ABS 指标

设 G 和 H 是两个简单图，则图 G 和 H 的笛卡尔积由 $G \square H$ 表示，定义为： $V(G \square H) = V(G) \times V(H)$ ， $E(G \square H) = \{(u, v)(u', v') : v = v' \text{ 且 } uu' \in E(G) \vee u = u' \text{ 且 } vv' \in E(H)\}$ [8] (见图 1 $C_4 \square P_6$)。设 G 和 H 是两个连通的二部图，其分部集为白色和黑色， G 是对称的，且 H 连通保圈可定向，则图 G 和 H 的半笛卡尔积由 $G \sqcup H$ 表示，定义为： $V(G \sqcup H) = V(G) \times V(H)$ ， $E(G \sqcup H) = \{(u, v)(u', v') : v = v' \text{ 且 } uu' \in E(G) \vee u = u' \text{ 且 } vv' \in E(H) \text{ 且 } u \text{ 和 } v \text{ 取相同颜色}\}$ ，其中 $v \rightarrow v'$ 在 H 的连通保圈定向上 [9] (见图 2 $P_{10} \sqcup P_8$)。

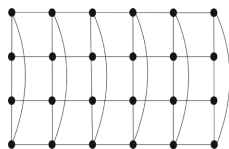
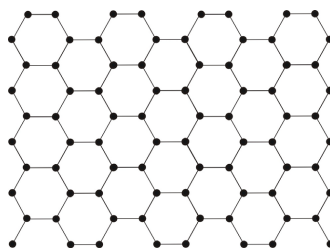


Figure 1. $C_4 \square P_6$

图 1. $C_4 \square P_6$

Figure 2. $P_{10} \square P_8$ 图 2. $P_{10} \square P_8$

本章将要讨论四角格子图和六角格子图的 ABS 指标，并得出相应的结果。

2.1. 四角格子图的 ABS 指标

平面四角格子图是由两条路 P_m , P_n 做笛卡尔积得到的图，由 $P_m \square P_n$ 表示；环状四角格子图是由两个圈 C_m 和 C_n 做笛卡尔积得到的图，由 $C_m \square C_n$ 表示；柱状四角格子图是由圈 C_m 和路 P_n 做笛卡尔积所得到的图，由 $C_m \square P_n$ (或 $P_n \square C_m$) 表示。

定理 1: 平面四角格子图 $P_m \square P_n$ ($m, n \geq 3$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_m \square P_n) = \frac{8}{5}\sqrt{15} + \left(\frac{2}{3}m + \frac{2}{3}n - 4\right)\sqrt{6} + \left(\frac{2}{7}m + \frac{2}{7}n - \frac{8}{7}\right)\sqrt{35} + \left(mn - \frac{5}{2}m - \frac{5}{2}n + 6\right)\sqrt{3} \quad (m, n \geq 3).$$

证明: $v(P_m \square P_n) = mn$ 和 $e(P_m \square P_n) = 2mn - n - m$ ，平面四角格子图的最大度 $\Delta_{P_m \square P_n} = 4$ ，最小度 $\delta_{P_m \square P_n} = 2$ ，当 $m, n \geq 3$ 时， $P_m \square P_n$ 恰有 8 条边连接最小度点和 $(\delta_{P_m \square P_n} + 1)$ 度点，有 $(2m + 2n - 12)$ 条边连接 $(\delta_{P_m \square P_n} + 1)$ 度点，有 $(2m + 2n - 8)$ 条边连接最大度点和 $(\delta_{P_m \square P_n} + 1)$ 度点，有 $(2mn - 5n - 5m + 12)$ 条边连接最大度点，所以它的 ABS 指标为

$$\begin{aligned} \text{ABS}(P_m \square P_n) &= 8\sqrt{1 - \frac{2}{\delta_u + (\delta_v + 1)}} + (2m + 2n - 12)\sqrt{1 - \frac{2}{(\delta_u + 1) + (\delta_v + 1)}} \\ &\quad + (2m + 2n - 8)\sqrt{1 - \frac{2}{\Delta_u + (\delta_v + 1)}} + (2mn - 5n - 5m + 12)\sqrt{1 - \frac{2}{\Delta_u + \Delta_v}} \\ &= 8\sqrt{1 - \frac{2}{2+3}} + (2m + 2n - 12)\sqrt{1 - \frac{2}{3+3}} + (2m + 2n - 8)\sqrt{1 - \frac{2}{4+3}} \\ &\quad + (2mn - 5n - 5m + 12)\sqrt{1 - \frac{2}{4+4}} \\ &= \frac{8}{5}\sqrt{15} + \left(\frac{2}{3}m + \frac{2}{3}n - 4\right)\sqrt{6} + \left(\frac{2}{7}m + \frac{2}{7}n - \frac{8}{7}\right)\sqrt{35} + \left(mn - \frac{5}{2}m - \frac{5}{2}n + 6\right)\sqrt{3}. \end{aligned}$$

推论 2: 环状四角格子图 $C_m \square C_n$ ($m, n \geq 3$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_m \square C_n) = mn\sqrt{3} \quad (m, n \geq 3).$$

证明: 由引理 1(4)可知 n 阶的 k -正则图的 ABS 指标为 $\text{ABS}(G) = \frac{n}{2}\sqrt{k^2 - k}$ ，显然，环状四角格子图 $C_m \square C_n$ 是一个 mn 阶的 4-正则图，则

$$\text{ABS}(C_m \square C_n) = \frac{mn}{2}\sqrt{4^2 - 4} = \frac{mn}{2}\sqrt{12} = mn\sqrt{3} \quad (m, n \geq 3).$$

定理 3: 柱状四角格子图 $C_m \sqcup P_n$ (或 $P_n \sqcup C_m$) ($m, n \geq 3$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_m \sqcup P_n) = \frac{2m}{3}\sqrt{6} + \frac{2m}{7}\sqrt{35} + \left(mn - \frac{5}{2}m\right)\sqrt{3} \quad (m, n \geq 3).$$

证明: 略。

2.2. 六角格子图的 ABS 指标

平面六角格子图是由两条路 P_m, P_n 做半笛卡尔积得到的图, 由 $P_m \sqcup P_n$ 表示; 环状六角格子图是由两个圈 C_m 和 C_n 做半笛卡尔积得到的图, 由 $C_m \sqcup C_n$ 表示; 柱状六角格子图是由圈 C_m 和路 P_n 做半笛卡尔积所得到的图, 由 $C_m \sqcup P_n$ (或 $P_m \sqcup C_n$) 表示。

定理 4: 平面六角格子图 $P_m \sqcup P_n$ (m 为偶数) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_m \sqcup P_n) = \begin{cases} \frac{n+3}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{3}(2mn-5m-4n+7)\sqrt{6} + \frac{2}{5}(m+n-5)\sqrt{15}, & n \text{ 为奇数} \\ \frac{n+3}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{6}(3mn-4m-9n+14)\sqrt{6} + \frac{2}{5}(m+m-5)\sqrt{15}, & n \text{ 为偶数} \end{cases}$$

证明 $v(P_m \sqcup P_n) = mn$, 当 n 为偶数时, $e(P_m \sqcup P_n) = \frac{3}{2}n(m-1)$, 当 n 为奇数时, $e(P_m \sqcup P_n) = 2mn - 3m - n$, 平面六角格子图的最小度 $\delta_{P_m \sqcup P_n} = 1$, 最大度 $\Delta_{P_m \sqcup P_n} = 3$ 。

当 n 为奇数时, $P_m \sqcup P_n$ 恰有 2 条边连接最小度点和最大度点, 有 $(2mn - 5m - 4n + 7)$ 条边连接最大度点, 有 $(n+1)$ 边连接 $(\Delta_{P_m \sqcup P_n} - \delta_{P_m \sqcup P_n})$ 度点, 有 $(2m + 2n - 10)$ 条边连接 $(\Delta_{P_m \sqcup P_n} - \delta_{P_m \sqcup P_n})$ 度点和最大度点, 因此它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_m \sqcup P_n) = \frac{n+3}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{3}(2mn-5m-4n+7)\sqrt{6} + \frac{2}{5}(m+n-5)\sqrt{15};$$

当 n 为偶数时, $P_m \sqcup P_n$ 恰有 2 条边连接最小度点和最大度点, $\left(\frac{3}{2}mn - 2m - \frac{9}{2}n + 7\right)$ 条边连接最大度点, $(n+1)$ 条边连接 $(\Delta_{P_m \sqcup P_n} - \delta_{P_m \sqcup P_n})$ 度点, $(2m + 2n - 10)$ 条边连接 $(\Delta_{P_m \sqcup P_n} - \delta_{P_m \sqcup P_n})$ 度点和最大度点, 则它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_m \sqcup P_n) = \frac{n+3}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{6}(3mn-4m-9n+14)\sqrt{6} + \frac{2}{5}(m+n-5)\sqrt{15}.$$

推论 5: 环状六角格子图 $C_m \sqcup C_n$ ($m, n \geq 4$, m, n 为偶数) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_m \sqcup C_n) = \frac{mn}{2}\sqrt{6} \quad (m, n \geq 4, m, n \text{ 为偶数}).$$

证明: 同推论 2。

定理 6: 柱状六角格子图 $C_m \sqcup P_n$ ($m, n \geq 4$, m 为偶数) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_m \sqcup P_n) = \frac{2m}{5}\sqrt{15} + \frac{1}{2}m\left(n - \frac{5}{3}\right)\sqrt{6} \quad (m, n \geq 4, m \text{ 为偶数}).$$

证明: $v(C_m \sqcup P_n) = mn$ 和 $e(C_m \sqcup P_n) = \frac{1}{2}m(3n-1)$, 它的最大度 $\Delta_{C_m \sqcup P_n} = 3$, 最小度 $\delta_{C_m \sqcup P_n} = 2$, $C_m \sqcup P_n$ 恰有 $2m$ 条边连接最大度点和最小度点, $\frac{1}{2}m(3n-5)$ 条边连接最大度点, 则它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_m \sqcup P_n) = \frac{2m}{5}\sqrt{15} + \frac{1}{2}m\left(n - \frac{5}{3}\right)\sqrt{6}.$$

定理 7: 柱状六角格子图 $P_m \sqcup C_n$ ($m, n \geq 4$, m 为偶数) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_m \sqcup C_n) = \frac{n}{2}\sqrt{2} + \frac{2n}{5}\sqrt{15} + \frac{3m-8}{6}\sqrt{6}.$$

证明: 略。

3. 几类化学图的 ABS 指标

本章将要讨论几类化学图的 ABS 指标, 其中包含锯齿形纳米管 $\text{TUHC}_6[2p, q]$, 即 $2p$ 阶圈与 q 阶路的半笛卡尔积 $C_{2p} \sqcup P_q$; 扶手椅型纳米管 $\text{TUVC}_6[2p, q]$, 即 q 阶路与 $2p$ 阶圈的半笛卡尔积 $P_q \sqcup C_{2p}$; **硅酸盐**是由金属氧化物或金属碳酸盐与沙子熔合而得, **硅酸盐链**是由 n 个四面体按线性链接构成的, 记为 CS_n , 其顶点数为 $3n+1$, 边数为 $6n$, CS_n 也可以看作是由 n 个 K_4 线性链接构成(见图 3); 我们可以将 CS_n 的有关计算推广到 n 长的 K_4 链; **六角链**是一个六角系统, 即每一个顶点至多属于两个六边形且每一个六边形至多与两个六边形相邻。用 L_n 和 Z_n 分别表示含 n 个六边形的直链(见图 4)和锯齿链(见图 5), 用 $L_{2 \times n}$ 和 $Z_{2 \times n}$ 分别表示含有 $2n$ 个六边形的双直链(见图 6)和双锯齿链(见图 7)。

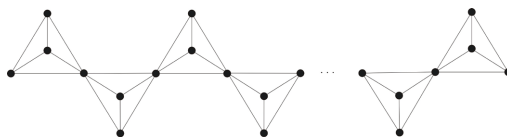


Figure 3. Silicate chain CS_n

图 3. 硅酸盐链 CS_n

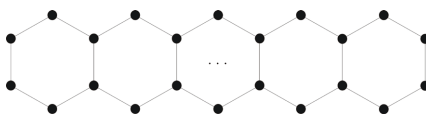


Figure 4. Straight chain L_n

图 4. 直链 L_n

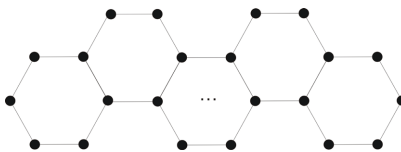


Figure 5. Zigzag chain Z_n

图 5. 锯齿链 Z_n

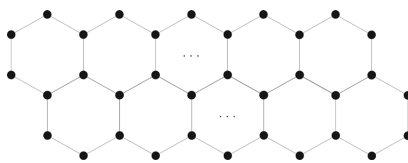
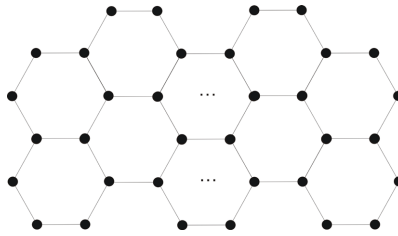


Figure 6. Double straight chain $L_{2 \times n}$

图 6. 直双链 $L_{2 \times n}$

Figure 7. Double zigzag chain $Z_{2 \times n}$ 图 7. 锯齿双链 $Z_{2 \times n}$

推论 8: 锯齿形纳米管 $\text{TUHC}_6[2p, q]$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_{2p} \sqcup P_q) = \frac{4p}{5}\sqrt{15} + p\left(q - \frac{5}{3}\right)\sqrt{6}.$$

证明: 由定理 6 可以直接得出。

推论 9: 锯齿形纳米管 $\text{TUVC}_6[2p, q]$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P_q \sqcup C_{2p}) = p\sqrt{2} + \frac{4p}{5}\sqrt{15} + \frac{p}{3}(3q - 8)\sqrt{6}.$$

证明: 由定理 7 可以直接得出。

定理 10: 硅酸盐链 CS_n ($n \geq 2$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(CS_n) = \frac{n+4}{3}\sqrt{6} + \frac{4n-2}{3}\sqrt{7} + \frac{n-2}{6}\sqrt{30}.$$

证明: $v(CS_n) = 3n+1$ 和 $e(CS_n) = 6n$, n 长的硅酸盐链的最大度 $\Delta_{CS_n} = 6$, 最小度 $\delta_{CS_n} = 6$, 它恰有 $n+4$ 条边连接最小度点, 有 $4n-2$ 条边连接最大度点和最小度点, 有 $n-2$ 条边连接最大度点, 所以它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(CS_n) = \frac{n+4}{3}\sqrt{6} + \frac{4n-2}{3}\sqrt{7} + \frac{n-2}{6}\sqrt{30}.$$

定理 11: 设图 G 为 n 长的 K_n 链, 则它的 ABS 指标为

$$\begin{aligned} \text{ABS}(G) = & \left(\frac{n^3}{2n-2} - \frac{5n^2}{2n-2} + \frac{5n-4}{n-1} \right) \sqrt{n^2 - 3n + 2} \\ & + (3n-3)(2n^2 - 6n + 6) \sqrt{9n^2 - 24n + 15} \\ & + 2(n-2)^2 \sqrt{4n^2 - 10n + 6}. \end{aligned}$$

证明: 略。

定理 12: 直链 L_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_n) = 3\sqrt{2} + \frac{4n-4}{5}\sqrt{15} + \frac{n-1}{3}\sqrt{6}.$$

证明: $v(L_n) = 4n+2$ 和 $e(L_n) = 5n+1$, 它的最大度 $\Delta_{L_n} = 3$, 最小度 $\delta_{L_n} = 2$, 六角形直链恰有 6 条边连接最小度点, $4n-4$ 条边连接最大度点和最小度点, $n-1$ 条边连接最大度点, 则它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_n) = 3\sqrt{2} + \frac{4n-4}{5}\sqrt{15} + \frac{n-1}{3}\sqrt{6}.$$

定理 13: 锯齿链 Z_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(Z_n) = \frac{n+4}{2}\sqrt{2} + \frac{2n}{5}\sqrt{15} + \frac{2n-3}{3}\sqrt{6}.$$

证明: 略。

定理 14: 直双链 $L_{2 \times n}$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_{2 \times n}) = 3\sqrt{2} + \frac{4n}{5}\sqrt{15} + \frac{4n-3}{3}\sqrt{6}.$$

证明: 略。

定理 15: 锯齿双链 $Z_{2 \times n}$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(Z_{2 \times n}) = \begin{cases} \frac{n+4}{2}\sqrt{2} + \frac{4n-6}{5}\sqrt{15} + \frac{3n+5}{3}\sqrt{6}, & n \text{ 为奇数} \\ \frac{n+4}{2}\sqrt{2} + \frac{4n-8}{5}\sqrt{15} + \frac{3n+7}{3}\sqrt{6}, & n \text{ 为偶数} \end{cases}.$$

证明: 略。

4. 几类仙人掌链图的 ABS 指标

仙人掌图是由多个顶点的圈组成的图。两个或两个以上六边形共用的顶点称为**切点**。若 G 是由六边形组成的仙人掌, 其中的每个六边形最多有两个切点, 并且每个切点恰好由两个六边形共用, 我们称 G 为**六边形仙人掌链(六角仙人掌链)**; 若是由三角形或四边形组成的仙人掌, 每个三角形(或四边形)最多有两个切点, 并且每个切点恰好由两个三角形(或四边形)共用, 我们称 G 为**三角仙人掌链(或四角仙人掌链)**, G 中多边形的数目称为链的长度, **仙人掌链**用 G_n 来表示, n 为多边形的个数。每一个 $G_n, n \geq 2$, 都恰好有两个只有一个切点的多边形。这样的多边形被称为**终端多边形**, 链上的其他多边形称为**内多边形**。 G_n 中的内多边形如果其切点相邻, 则称为**正位多边形**, 切点之间的距离为 2, 则称为**元位多边形**, 切点之间的距离为 3, 则称为**对位多边形**。同样的, 以这三种方式交接的仙人掌链称**正位链**、**元位链**、**对位链**。

本章主要讨论这三种方式交接的几类仙人掌链的 ABS 指标。

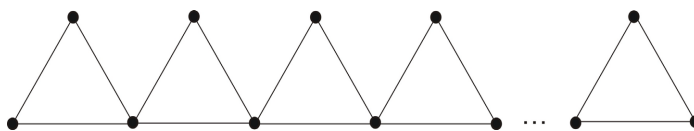


Figure 8. Triangular cactus chain T_n

图 8. 三角仙人掌链 T_n

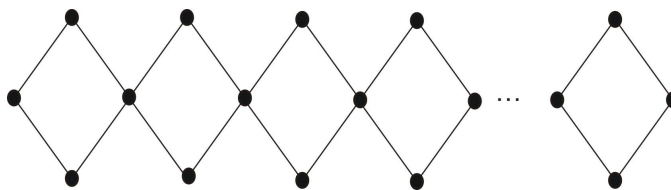
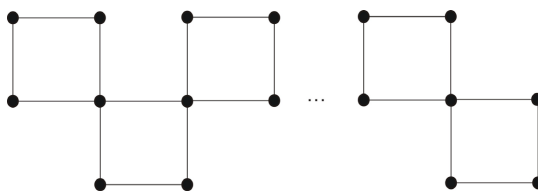
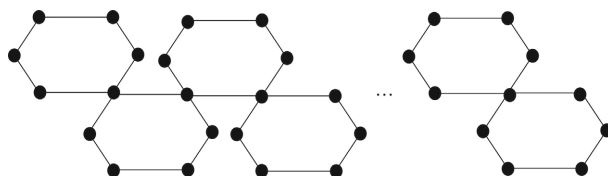
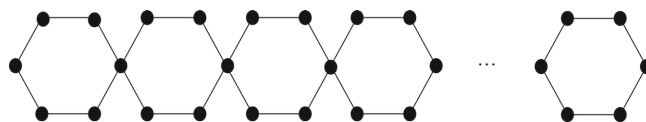
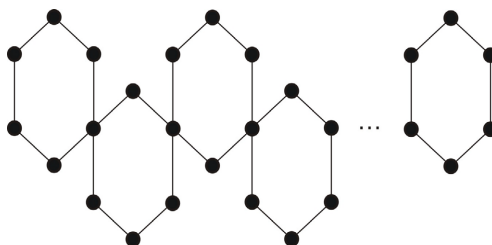


Figure 9. Square cactus meta-chain Q_n

图 9. 元位四角仙人掌链 Q_n

Figure 10. Square cactus ortho-chain O_n 图 10. 正位四角仙人掌链 O_n Figure 11. Ortho-chain O_n^h 图 11. 正位仙人掌链 O_n^h Figure 12. Para-chain L_n 图 12. 对位仙人掌链 L_n Figure 13. Meta-chain M_n 图 13. 元位仙人掌链 M_n

定理 16: (1) 三角仙人掌链 (Triangular cactus chain) T_n (见图 8) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(T_n) = \sqrt{2} + \frac{2n}{3}\sqrt{6} + \frac{n-2}{2}\sqrt{3};$$

(2) 元位四角仙人掌链 (Square cactus meta-chain) Q_n (见图 9) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(Q_n) = 2\sqrt{2} + \frac{4n-4}{3}\sqrt{6};$$

(3) 正位四角仙人掌链 (Square cactus ortho-chain) O_n (见图 10) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(O_n) = \frac{n+2}{2}\sqrt{2} + \frac{2n}{3}\sqrt{6} + \frac{n-2}{2}\sqrt{3};$$

(4) 正位仙人掌链 (Ortho-chain) O_n^h (见图 11) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(O_n^h) = \frac{3n+2}{2}\sqrt{2} + \frac{2n}{3}\sqrt{6} + \frac{n-2}{2}\sqrt{3};$$

(5) 对位仙人掌链(Para-chain) L_n (见图 12 所示)的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_n) = (n+2)\sqrt{2} + \frac{4n-4}{3}\sqrt{6};$$

(6) 元位仙人掌链(Meta-chain) M_n (见图 13)的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(M_n) = (n+2)\sqrt{2} + \frac{4n-4}{3}\sqrt{6}.$$

证明: (1)显然有 $v(T_n) = 2n+1$ 和 $e(T_n) = 3n$ 。根据图的结构, 它的最小度 $\delta_{T_n} = 2$ 和最大度 $\Delta_{T_n} = 4$, T_n 中恰有 2 条边连接最小度点, 有 $2n$ 条边连接最小度点和最大度点, $n-2$ 条边连接最大度点, 所以它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(T_n) = \sqrt{2} + \frac{2n}{3}\sqrt{6} + \frac{n-2}{2}\sqrt{3};$$

(2)、(3)、(4)、(5)、(6)证明同(1)。

由(5)和(6)可知 $\text{ABS}(L_n) = \text{ABS}(M_n)$ 。

5. 一些特殊图的 ABS 指标

在圈 C_n 的每个点上连接一个 3 阶圈 C_3 , 则得到一类**特殊的仙人掌图**, 它的点集和边集为

$$V(C_n \cdot C_3) = \{v_{ij} \mid i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, 3\},$$

$$E(C_n \cdot C_3) = \{v_{i1}v_{(i+1)1} \mid i = 1, 2, \dots, n\} \cup \{v_{ij}v_{(i+j)1} \mid i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, 3\},$$

由 $C_n \cdot C_3$ 表示(见图 14 为 $C_5 \cdot C_3$)。**轮图**是通过将圈 C_n 上的每个点和一个外点都连边的图, 由 W_n 表示(见图 15 W_8)。**扇图**是轮图 W_n 删去圈上的任意一条边而得到的图, 由 F_n 表示。**蝴蝶结图**是两个阶数相同的扇图 F_n 通过粘贴中心点而得到的图, 由 $B_{n,n}$ 表示。**荷兰风车图**是通过粘贴 n 个圈 C_4 的一个公共顶点而得到的图, 由 D_4^n ($n \geq 2$) 表示(见图 16 D_4^4)。**棒棒糖图**是将一个路 P_{b+1} 连接在圈 C_a 上。**风筝图**是将一个路 P_{b+1} 连接在 K_a 上, 由 $L_{a,b}$ 表示(见图 17)。 ∞ -图是由两个互不相交的圈 C_k , C_a 和一个路 P_p , 其中这两个圈 C_k 和 C_q 通过 P_p 连接, 由 $B(k, p, q)$ 表示(见图 18)。 θ -图是将三条路 P_{k+1} 、 P_{p+1} 、 P_{q+1} 相互连接, 由 $P(k, p, q)$ 表示(见图 19)。

在本章将要讨论以上提到的几类特殊图的 ABS 指标, 并得出确切的值。

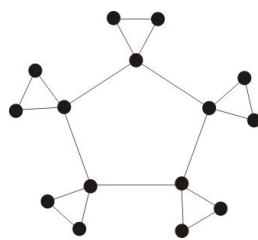


Figure 14. $C_5 \cdot C_3$

图 14. $C_5 \cdot C_3$

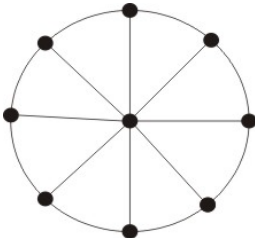


Figure 15. W_8
图 15. W_8

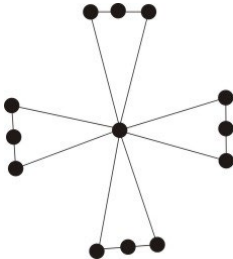


Figure 16. D_4^4
图 16. D_4^4

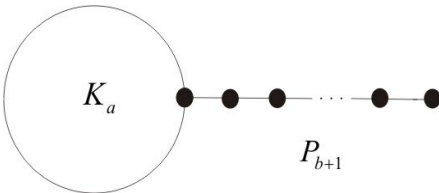


Figure 17. $L_{a,b}$
图 17. $L_{a,b}$

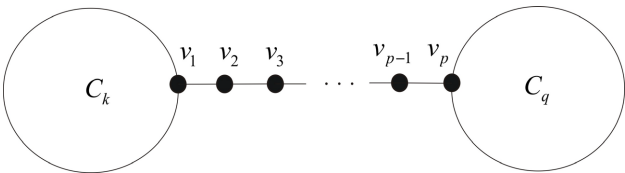


Figure 18. ∞ -graph $B(k,p,q)$
图 18. ∞ -图 $B(k,p,q)$

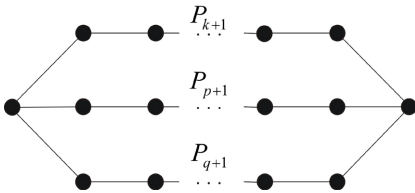


Figure 19. θ -graph $P(k,p,q)$
图 19. θ -图 $P(k,p,q)$

定理 17: 荷兰风车图 D_4^n ($n \geq 2$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(D_4^n) = n\sqrt{2} + \frac{2n}{n+1}\sqrt{n^2+n} \quad (n \geq 2)。$$

证明: 依次给出 D_4^n 的阶数和边数, 显然有 $v(D_4^n) = 3n+1$ 和 $e(D_4^n) = 4n$ 。根据荷兰风车图的定义, 当 $n \geq 2$ 时它的最小度 $\delta_{D_4^n} = 2$ 和最大度 $\Delta_{D_4^n} = 2n$, D_4^n 中恰有 $2n$ 条边连接最小度点, 有 $2n$ 条边连接最小度点和最大度点, 所以它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(D_4^n) = n\sqrt{2} + \frac{2n}{n+1}\sqrt{n^2+n}。$$

定理 18: 轮图 W_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(W_n) = \frac{n}{n+3}\sqrt{n^2+4n+3} + \frac{n}{3}\sqrt{6} \quad (n \geq 3)。$$

证明: 略。

定理 19: 扇图 F_n 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(F_n) = \frac{2}{n+2}\sqrt{n^2+2n} + \frac{n-2}{n+3}\sqrt{n^2+4n+3} + \frac{2}{5}\sqrt{15} + \frac{n-3}{3}\sqrt{6} \quad (n \geq 3)。$$

证明: 略。

定理 20: 蝴蝶结图 $B_{n,n}$ ($n \geq 2$) 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(B_{n,n}) = \begin{cases} \sqrt{2} + \frac{4}{3}\sqrt{6}, & \text{当 } n=2 \\ \frac{4}{5}\sqrt{15} + \frac{4}{n+1}\sqrt{n^2+n} + \frac{2n-4}{2n+3}\sqrt{4n^2+8n+3} + \frac{2n-6}{3}\sqrt{6}, & \text{当 } n \geq 3 \end{cases}。$$

证明: $v(B_{n,n}) = 1+2n$ 和 $e(B_{n,n}) = 4n-2$, 当 $n=2$ 时最小度 $\delta_{B_{n,n}} = 2$, 最大度 $\Delta_{B_{n,n}} = 4$, 当 $n \geq 3$ 时最小度 $\delta_{B_{n,n}} = 2$, 最大度 $\Delta_{B_{n,n}} = 2n$ 。对于 $n=2$, $B_{n,n}$ 恰有 2 条边连接最小度点, 4 条边连接最小度点和最大度点, 所以

$$\text{ABS}(B_{2,2}) = \sqrt{2} + \frac{4}{3}\sqrt{6};$$

对于 $n \geq 3$, $B_{n,n}$ 恰有 4 条边连接 $(\delta_{B_{n,n}}+1)$ 度点和最小度点, 有 4 条边连接最小度点和最大度点, $2(n-2)$ 条边连接 $(\delta_{B_{n,n}}+1)$ 度点和最大度点, $2(n-3)$ 条边连接 $(\delta_{B_{n,n}}+1)$ 度点, 因而

$$\text{ABS}(B_{n,n}) = \frac{4}{5}\sqrt{15} + \frac{4}{n+1}\sqrt{n^2+n} + \frac{2n-4}{2n+3}\sqrt{4n^2+8n+3} + \frac{2n-6}{3}\sqrt{6}。$$

定理 21: 一类特殊的仙人掌图 $C_n \cdot C_3$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(C_n \cdot C_3) = \frac{n}{2}\sqrt{2} + \frac{n}{2}\sqrt{3} + \frac{2n}{3}\sqrt{6} \quad (n \geq 3)。$$

证明: 略。

定理 22: 棒棒糖图 $N_{a,b}$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(N_{a,b}) = \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{1}{2}(a+b-1)\sqrt{2}。$$

证明：略。

定理 23: 对于风筝图 $L_{a,b}$ ，它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_{a,b}) = \begin{cases} \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{b+2}{2}\sqrt{2}, & \text{当 } a=3 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{b-2}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{a+2}\sqrt{a^2+2a} + \frac{a-1}{2a-1}\sqrt{4a^2-8a+3} + \frac{a-2}{2}\sqrt{a^2-3a+2}, & \text{当 } a \geq 4 \end{cases}.$$

证明： $v(L_{a,b}) = a+b$ 和 $e(L_{a,b}) = \frac{1}{2}a(a-1)+b$ ，它的最小度 $\delta_{L_{a,b}} = 1$ ，最大度 $\Delta_{L_{a,b}} = 1$ ，

当 $a=3$ 时， $L_{3,b} \cong N_{3,b}$ ，由定理 6 可得

$$\text{ABS}(L_{3,b}) = \text{ABS}(N_{3,b}) = \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{b+2}{2}\sqrt{2};$$

当 $a \geq 4$ 时， $L_{a,b}$ 恰有 1 条边连接最小度点和 $(\delta_{L_{a,b}} + 1)$ 度点，有 $(b-2)$ 条边连接 $(\delta_{L_{a,b}} + 1)$ 度点，有 1 条边连接最大度点和 $(\delta_{L_{a,b}} + 1)$ 度点，有 $(a-1)$ 条边连接最大度点和 $(\Delta_{L_{a,b}} - 1)$ 度点，有 $\frac{1}{2}(a-1)(a-2)$ 条边连接 $(\Delta_{L_{a,b}} - 1)$ 度点，因此它的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(L_{a,b}) = \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{b-2}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{a+2}\sqrt{a^2+2a} + \frac{a-1}{2a-1}\sqrt{4a^2-8a+3} + \frac{a-2}{2}\sqrt{a^2-3a+2} \quad (a \geq 4).$$

定理 24: ∞ -图 $B(k, p, q)$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(B(k, p, q)) = \frac{6}{5}\sqrt{15} + \frac{1}{2}(k+p+q-7)\sqrt{2}.$$

证明：略。

定理 25: θ -图 $P(k, p, q)$ 的 ABS 指标为

$$\text{ABS}(P(k, p, q)) = \frac{6}{5}\sqrt{15} + \frac{1}{2}(k+p+q-6)\sqrt{2}.$$

证明：略。

6. 总结

本文通过观察图的结构特点，给出对应图的边集的划分，进而计算了格子图、几类化学图、几类仙人掌链以及一些特殊图的 ABS 指标值。研究各类图的基于顶点度的拓扑指标必定有着较广阔的发展前景，也必将得到更进一步的研究和应用。可以进一步研究 ABS 指标与分子物理化学性质(如沸点、硬度)之间的相关性；考虑有缺陷的格子图或纳米管，分析缺陷结构下 ABS 指标的变化规律。

参考文献

- [1] Randić, M. (1975) Characterization of Molecular Branching. *Journal of the American Chemical Society*, **97**, 6609-6615. <https://doi.org/10.1021/ja00856a001>
- [2] Gutman, I. and Furtula, B. (2008) Recent Results in the Theory of Randić Index. University of Kragujevac.
- [3] Estrada, E., Torres, L., Rodriguez, L., et al. (1998) An Atom-Bond Connectivity Index: Modelling the Enthalpy of Formation of Alkanes. *Indian Journal of Chemistry—Section A*, **37**, 849-855.
- [4] Zhou, B. and Trinajstić, N. (2009) On a Novel Connectivity Index. *Journal of Mathematical Chemistry*, **46**, 1252-1270. <https://doi.org/10.1007/s10910-008-9515-z>

-
- [5] Ali, A., Furtula, B., Redžepović, I. and Gutman, I. (2022) Atom-Bond Sum-Connectivity Index. *Journal of Mathematical Chemistry*, **60**, 2081-2093. <https://doi.org/10.1007/s10910-022-01403-1>
 - [6] Ali, A., Gutman, I. and Redžepović, I. (2023) Atom-Bond Sum-Connectivity Index of Unicyclic Graphs and Some Applications. *Electronic Journal of Mathematics*, **5**, 1-7.
 - [7] Alraqad, T.A., Milovanović, I.Ž., Saber, H., *et al.* (2022) Minimum Atom-Bond Sum-Connectivity Index of Trees with a Fixed Order and/or Number of Pendent Vertices. arXiv: 2211.05218v3.
 - [8] Imrich, W. and Klavzar, S. (2000) Product Graphs: Structure and Recognition. Wiley.
 - [9] Metsidik, M. (2014) Semi-Cartesian Product of Graphs. *Journal of Mathematical Chemistry*, **52**, 856-865. <https://doi.org/10.1007/s10910-013-0297-6>