碳纳米管 Y 形结的基于 NM 多项式的拓扑指数和图熵的计算分析

Sohan Lal[1],Vijay Kumar Bhat[1,*], Sahil Sharma[1]

[1]数学学院，Shri Mata Vaishno Devi University,

印度查谟和克什米尔卡特拉 182320。

*sohan1993sharma@gmail.com, vijaykumarbhat2000@yahoo.com, sahilsharma2634@gmail.com

摘要

碳纳米管Y形结在下一代创新型多端纳米器件领域备受关注。拓扑指数是基于图论的参数，用于描述化学分子的各种结构性质。图的熵是一种拓扑描述符，用于表征相应分子图的复杂性。熵是热力学系统的一种物理性质。图熵是针对各种图不变量定义的重要热物理量，可用于衡量分子的异质性和相对稳定性。本文计算了碳纳米管 Y 形结图的若干基于邻域度和的拓扑指数，包括基于图的熵。

关键词： 扶手椅型碳纳米管，图熵，NM 多项式，拓扑指数，Y形结图。

MSC（2020）： 05C10，05C35，05C90

arXiv:2301.02169v1 [cond-mat.mes-hall] 3 Jan 2023

1 引言

《纳米技术》因其不断发展、电子传输性质以及低成本实现方式而备受关注。纳米管 [1], 于1985年被发现，碳纳米管 [2] 于1991年被发现。在纳米科学与技术领域，L形、T形、X形和Y形等分支状或非直线型碳纳米管在电子器件中有诸多应用，例如三端晶体管、多端纳米电子学、开关、放大器等， [3, 4, 5, 6, 7, 8]。这些接头是制造具有更优开关性能且在室温下传输特性可靠的纳米级电子器件的绝佳选择。关于碳纳米管Y形结的更多应用，参见 [9, 10, 11]。

首个提出的支化碳纳米管呈 Y 形，通常称为 Y 形结或三端结。根据相连碳纳米管的手性，这些结可分为扶手椅型、锯齿型或手性型。此外，它们可以是单壁或多壁、对称或非对称、封端或未封端。若碳纳米管两端均为开口，则称为未封端。若在 Y 形结中相接的纳米管彼此相同、七边形彼此孤立且呈对称分布，则该 Y 形结称为对称的。关于各种对称和非对称碳纳米管 Y 形结，请参见 [12, 13, 14, 15]。

碳纳米管 Y 形结由三根相同的碳纳米管以 Y 形排列连接而成。这些结在分支点处恰好包含六个六边形以及若干七边形。Chernozatonskii [16] 和 Scuseria [17], 于1992年各自独立提出了对称单壁扶手椅型碳纳米管 Y 形结的首个结构模型。这些结于1995年通过实验观测到 [18] 。关于碳纳米管 Y 形结图的更多应用和性质，请参见 [19, 20, 21]。

数学化学是理论化学的一个分支，它运用数学技术来解释化学分子的分子结构及其物理化学性质。分子图是化学分子的可视化表示，其中顶点表示原子，边表示原子之间的化学键 [22]。设 $G = (V(G)\ E(G))$ 为一个分子图，其顶点集为 $V(G)$，边集为 $E(G)$。分子图 G 的阶定义为 G 中顶点的总数，记作 $|V(G)|$； G 中边的数量称为 G 的大小，记作 $|E(G)|$。连接图中顶点 u 和 v 的任意边记作 $e = uv \in E(G)$。如果图 G 的两个顶点之间存在一条边，则称它们相邻。顶点 $v \in V(G)$ 的度记作 $d(v)$，定义为与其相邻的顶点数，即

顶点 v，即 $d(v)=|\{u:\ e=uv\in E(G)\}|$。顶点 $v\in V(G)$ 的邻域度数和记作 $d_n(v)$，定义为与 v 相邻的所有顶点的度之和，即 $d_n(v)=\sum d(v):\ uv\in E(G)$。使 $G\setminus K_u$ 成为非连通图的集合 $K\subseteq V(G)$ 的最小基数，称为连通图 G 的连通度或点连通度。如果连通图 G 的连通度为 k，则称其为 k-连通图。

拓扑指数是根据分子图计算得到的数值，用于描述化学分子的各种结构性质。在各种定量构效/构效关系（QSPR/QSAR）研究中，它们常用于建立多种物理化学性质的模型 [23, 24, 25]。1947年，化学家 Harold Wiener [26] 提出了拓扑指数的概念。此后，人们提出了各种拓扑指数，并开展了大量研究，以计算不同分子图和网络的指数。基于边的端点度数的拓扑指数，无需使用任何权重实验室 [24]，即可预测分子的各种物理化学性质，例如生成热、应变能、熵、焓、沸点、闪点等。

扎格雷布指数及其变体已用于研究分子复杂性、ZE-异构现象和手性 [27]。总体而言，扎格雷布指数已显示出用于推导多元线性回归模型的适用性。Ghorbani 和 Hosseinzadeh [28] 提出了第三版Zagreb指数，并指出该指数与辛烷异构体的偏心因子和熵具有良好的相关性。Mondal等人 [29] 提出了基于邻域度和的拓扑指数，即遗忘拓扑指数的邻域版本和第二修正Zagreb指数的邻域版本，并讨论了这些新指数的一些数学性质和简并性。关于更多基于邻域度和的拓扑指数、其性质及应用，请参阅 [24, 30, 31]。

根据定义计算分子图的拓扑指数是一个复杂且耗时的过程。因此，对于特定类别的图和网络，代数多项式在减少计算其拓扑指数所需的时间和复杂度方面发挥着重要作用。简而言之，借助代数多项式，人们可以在很短时间内轻松计算各种图指数。NM 多项式在计算基于邻域度和的拓扑指数方面发挥着至关重要的作用。令 $d_n(v)$ 表示顶点 $v\in V(G)$ 的邻域度数和。那么，G 的邻域 M 多项式（NM 多项式）定义为 [30, 32, 33]

$$NM(G;x,y)=\sum_{i\le j}|E_{ij}(G)|x^iy^j \tag{1}$$

wher其中，$|E_{ij}(G)|, i,\ j\ge 1$ 表示满足 $\{d_n(u)=i,\ d_n(v)=j$ 的所有边 $e=uv\in E(G)$ 的数量 $\}$.

近年来，人们通过 NM 多项式技术计算了各种基于邻域度和的拓扑指数。例如，Mondal等人 [30, 34] 利用其 NM 多项式，得到了分子图的一些邻域度和及乘法邻域度和指数。Kirmani等人 [24]和 Mondal等人 [35], 通过 NM 多项式技术，研究了用于治疗2019冠状病毒病的抗病毒药物的一些基于邻域度和的拓扑指数。Shanmukha等人 [36] 通过 NM 多项式方法计算了多孔石墨烯的拓扑指数。关于通过 NM 多项式计算的更多基于邻域度和的拓扑指数，请参阅 [24, 35, 37, 38]。

表1列出了一些基于邻域度和的拓扑指数及其由 NM 多项式推导的过程。

在化学图论中，图的结构信息量 [39] 的确定大多基于对图进行顶点划分，以获得其顶点集 [40] 的概率分布。基于这样的概率分布，可以定义图的熵。因此，图的结构信息量被定义为底层图拓扑的熵。图熵或图的熵这一概念最早出现在 [41], ，当时人们使用分子图来研究生物体的信息含量。基于熵的方法是研究控制论、数学化学、模式识别和计算物理学 [22, 39, 42, 43, 44]中各种问题的有力工具。

表1：部分拓扑指数及其由 NM 多项式推导出的表达式

拓扑指数	公式	由 $NM(G;\ x,\ \ y)$ 推导
第三版 Zagreb 指数 [28]: $NM_1(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (d_n(u)+d_n(v))$	$(D_x+D_y)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域第二 Zagreb 指数 [29]: $NM_2(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (d_n(u)d_n(v))$	$(D_xD_y)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域第二修正 Zagreb 指数 [30]: ${}^{nm}M_2(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (\frac{1}{d_n(u)d_n(v)})$	$(S_xS_y)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域遗忘拓扑指数 [29]: $NF(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (d_n^2(u)+d_n^2(v))$	$(D_x^2+D_y^2)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=\ \ y=1}$
第三 NDe 指数 [30]: $ND_3(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} d_n(u)d_n(v)(d_n(u)+d_n(v))$	$D_xD_y(D_x+D_y)(NM(G;\ x,\ \ y))\|_{x=y=1}$
邻域广义 Randić 指数 [30]: $NR_\alpha(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} d_n^\alpha(u)d_n^\alpha(v)$	$(D_x^\alpha D_y^\alpha)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域逆兰蒂奇指数 [30]: $NRR_\alpha(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} \frac{1}{d_n^\alpha(u)d_n^\alpha(v)}$	$(S_x^\alpha S_y^\alpha)(NM(G;\ x,\ \ y))\|_{x=y=1}$
第五 NDe 指数 [30]: $ND_5(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (\frac{d_n^2(u)+d_n^2(v)}{d_n(u)d_n(v)})$	$(D_xS_y+S_xD_y)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域调和指数 [30]: $NH(G)$	$\sum_{ab\in E(G)} \frac{2}{d_n(u)+d_n(v)}$	$2S_xT(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$
邻域逆度数和指数 [30]: $NI(G)$	$\sum_{uv\in E(G)} (\frac{d_n(u)d_n(v)}{d_n(u)+d_n(v)})$	$(S_xTD_xD_y)(NM(G;\ x,\ y))\|_{x=y=1}$

其中，$D_x = x(\frac{\partial(NM(G;x,y))}{\partial x})$，$D_y = y(\frac{\partial(NM(G;x,y))}{\partial y})$，$S_x = \int_0^x \frac{NM(G;t,y)}{t}\ dt$，
$S_y = \int_0^y \frac{NM(G;x,t)}{t}\ dt$，$T(NM(G;\ x,y)) = NM(G;\ x,x)$ 。

熵是衡量系统中随机性、不确定性、异质性或信息缺失程度的指标。基于信息指数，可以采用多种方法，根据给定化学分子 [45]的拓扑结构推导图熵。例如，Trucco [39] 和Rashevsky[41] 根据分子图的顶点度、扩展度序列和顶点数定义了图熵。Tan和Wu [46] 利用基于顶点度的熵研究网络异质性。Mowshowitz根据图顶点集上的等价关系定义图的熵，并讨论了与结构信息[47, 48, 49, 50]相关的一些性质。

最近，Shabbir 和 Nadeem [51] 根据碳纳米管 Y 形结分子图的拓扑指数定义了图熵，并建立了图熵与拓扑指数之间的回归模型。Nadeem 等人 [52] 计算了扶手椅型碳半封端纳米管和封端纳米管的一些基于度的拓扑指数，并研究了它们的化学性质和物理性质。Baˇca 等人 [53] 计算了碳纳米管网络的一些基于度的拓扑指数，并研究了其性质。Azeem 等人 [54]计算了碳纳米管 Y 形结及其变体的一些基于 M 多项式的拓扑指数。Ahmad [55], 研究了一些碳纳米管 Y 形结的基于 ve-度的拓扑指数，并讨论了它们的性质。Ayesha [56]计算了对称单壁扶手椅型碳纳米管 Y 形结的键能，并建立了键能与拓扑指数之间的回归模型。Rahul 等人 [57] 利用香农方法计算了石墨烯、石墨炔和石墨二炔的一些基于度的拓扑指数和图熵。

上述文献以及碳纳米管在纳米科学与技术领域的应用，促使我们进一步研究碳纳米管Y形接头及其变体的分子结构。此外，目前尚无关于 Y 形结图的基于 NM 多项式的拓扑指数和指标熵的研究报道。因此，本研究的主要贡献包括以下内容:

- 计算碳纳米管 Y 形结图的 NM 多项式。
- Co根据 NM 多项式计算若干基于邻域度和的拓扑指数 .
- 定义并计算了若干基于拓扑指数的图指标熵。

- 对所得拓扑指数及 Y 形结图的图指标熵进行了比较分析。

2 目标与方法

我们采用边划分技术、图论工具、组合计算和度计数法推导结果。利用端点的度生成 Y 形结图的边划分模式。基于这些划分，推导出 NM 多项式的一般表达式。随后，借助表1，从 NM 多项式的一般表达式中得到若干基于邻域度和的拓扑指数。此外，我们利用边权函数定义了以拓扑指数表示的图指标熵，并计算了 Y 形结图的相关熵。

本文结构如下：第3节定义基于拓扑指数的图熵。第4节介绍 Y 形结图及其构造。第5节给出 Y 形结图的 NM 多项式一般表达式及基于邻域度和的拓扑指数。第6节介绍 Y 形结图的图指标熵。第7节讨论研究结果的数值分析。最后，第8节总结并讨论结论。

3 定义与预备知识

本节中，我们根据边权函数定义图指标熵。2008年，Dehmer[40]将连通图 G 的熵定义如下：

定义 1. [40] 设 $G = (V(G), E(G))$ 是一个阶为 n 的连通图，且 g 是任意的信息泛函。那么， G 的熵定义为

$$H_g(G) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{g(v_i)}{\sum\limits_{i=1}^{n} g(v_i)} log\left(\frac{g(v_i)}{\sum\limits_{i=1}^{n} g(v_i)}\right). \tag{2}$$

由于定义在图的顶点集上的信息函数是任意函数，因此 Dehmer 的定义表明，改变信息泛函的选择可以生成各种图熵。有关此类图熵，可参见 [58, 59, 60]。

设 $\beta: E(G) \to \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ 是一个边权函数，且 $d_n(u) = \sum\limits_{uv \in E(G)} d(u)$ 表示与顶点 $u \in V(G)$ 相 incident 的边的端点度数之和（也称为顶点 u的邻域度数和）。那么，对于八种不同的边权函数，第三类 Zagreb 指数、邻域第二 Zagreb 指数、邻域遗忘拓扑指数、邻域第二修正 Zagreb 指数、第三 NDe 指数、第五 NDe 指数、邻域调和指数和邻域逆度数和指数熵定义如下：

- **第三类 Zagreb 指数熵：** 若 $e = uv$ 是连通图 G 的一条边，且$\beta_1(e) = d_n(u) + d_n(v)$ 是定义在 $E(G)$ 上的边权函数。那么，第三类 Zagreb 指数为

$$NM_1(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} \beta_1(e) = \sum_{e=uv \in E(G)} d_n(u) + d_n(v). \tag{3}$$

该边权函数的公式 (2) 给出

$$\begin{aligned} H_{\beta_1}(G) &= -\sum_{e \in E(G)} \frac{\beta_1(e)}{\sum\limits_{e \in E(G)} \beta_1(e)} log\left(\frac{\beta_1(e)}{\sum\limits_{e \in E(G)} \beta_1(e)}\right) \\ &= -\frac{1}{\sum\limits_{e \in E(G)} \beta_1(e)} \sum_{e \in E(G)} \beta_1(e)\left(log(\beta_1(e)) - log \sum_{e \in E(G)} \beta_1(e)\right) \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\sum\limits_{e\in E(G)}\beta_1(e)}\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)log(\beta_1(e)) + \frac{1}{\sum\limits_{e\in E(G)}\beta_1(e)}\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)log\Big(\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)\Big)$$

$$= log\Big(\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)\Big) - \frac{1}{\sum\limits_{e\in E(G)}\beta_1(e)}\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)log(\beta_1(e)).$$

在上述公式中将 $\sum \quad \beta_1(e)$ 替换为 $NM_1(G)$ 后，我们得到以下第三版$_{e\in E(G)}$Zagreb 指数熵

$$H_{\beta_1}(G) = log(NM_1(G)) - \frac{1}{NM_1(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_1(e)log\beta_1(e). \tag{4}$$

类似地，我们定义其他图指标熵如下:

• **邻域第二 Zagreb 指数熵：** 对于 $\beta_2(e) = d_n(u)d_n(v)$，邻域第二 Zagreb 指数和邻域第二 Zagreb 指数熵为

$$NM_2(G) = \sum_{e=uv\in E(G)} d_n(u)d_n(v), \tag{5}$$

and

$$H_{\beta_2}(G) = log(NM_2(G)) - \frac{1}{NM_2(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_2(e)log\beta_2(e). \tag{6}$$

• **邻域遗忘拓扑指数熵：** 对于 $\beta_3(e) = d_n^2(u) + d_n^2(v)$，邻域遗忘拓扑指数和邻域遗忘拓扑指数熵为

$$NF(G) = \sum_{e=uv\in E(G)} d_n^2(u) + d_n^2(v), \tag{7}$$

and

$$H_{\beta_3}(G) = log(NF(G)) - \frac{1}{NF(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_3(e)log\beta_3(e). \tag{8}$$

• **邻域第二修正 Zagreb 指数熵：** 对于 $\beta_4(e) = {}_{d_n\ u}{}^{1}{}_{()d_n(v)}$，邻域第二修正 Zagreb 指数和邻域第二修正 Zagreb 指数熵为

$${}^{nm}M_2(G) = \sum_{e=uv\in E(G)}\frac{1}{d_n(u)d_n(v)}, \tag{9}$$

and

$$H_{\beta_4}(G) = log({}^{nm}M_2(G)) - \frac{1}{{}^{nm}M_2(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_4(e)log\beta_4(e). \tag{10}$$

• **第三 NDe 指数熵：** 对于 $\beta_5(e) = d_n(u)d_n(v)\big(d_n(u) + d_n(v)\big)$，第三 NDe 指数和第三 NDe 指数熵为

$$ND_3(G) = \sum_{e=uv\in E(G)} d_n(u)d_n(v)\big(d_n(u) + d_n(v)\big), \tag{11}$$

and

$$H_{\beta_5}(G) = log(ND_3(G)) - \frac{1}{ND_3(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_5(e)log\beta_5(e). \tag{12}$$

• **第五 NDe 指数熵：** 对于 $\beta_6(e) = {}^{d_n(u)\ d_n(v)}{}_{+}{}^{d_n(v)\ d_n(u)}$，第五 NDe 指数和第五 NDe 指数熵分别为

$$ND_5(G) = \sum_{e=uv\in E(G)}\frac{d_n(u)}{d_n(v)} + \frac{d_n(v)}{d_n(u)}, \tag{13}$$

and

$$H_{\beta_6}(G) = log(ND_5(G)) - \frac{1}{ND_5(G)}\sum_{e\in E(G)}\beta_6(e)log\beta_6(e). \tag{14}$$

• **邻域调和指数熵：** 对于 $\beta_7(e) = {}_{d_n\ u}{}^{2}{}_{()+d_n(v)}$，邻域调和指数和邻域调和指数熵分别为

$$NH(G) = \sum_{e=uv\in E(G)} \frac{2}{d_n(u)+d_n(v)}, \tag{15}$$

and

$$H_{\beta_7}(G) = log(NH(G)) - \frac{1}{NH(G)} \sum_{e\in E(G)} \beta_7(e) log\beta_7(e). \tag{16}$$

• **邻域逆和入度指数熵：** 对于 $\beta_8(e) = {}^{d_n}{}_{(u)d_n(v)\ d_n(u)+d_n(v)}$，邻域逆和指数和邻域逆和指数熵分别为

$$NI(G) = \sum_{e=uv\in E(G)} \frac{d_n(u)d_n(v)}{d_n(u)+d_n(v)}, \tag{17}$$

and

$$H_{\beta_8}(G) = log(NI(G)) - \frac{1}{NI(G)} \sum_{e\in E(G)} \beta_8(e) log\beta_8(e). \tag{18}$$

4 Y 形结图

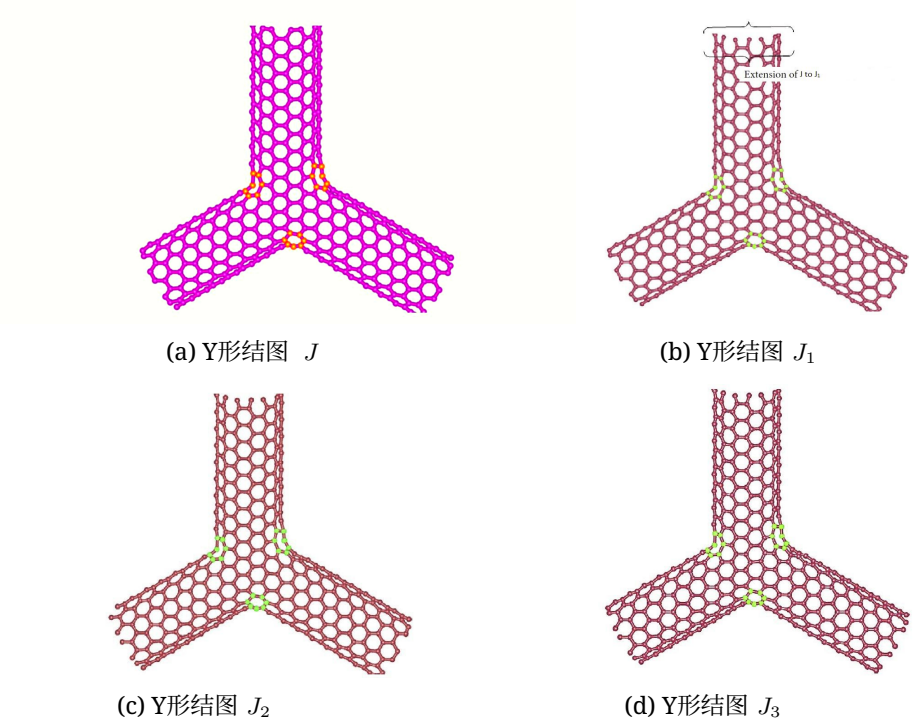
本研究考察的 Y 形结由三根相同的单壁碳纳米管以 $120°$ 角交叉共价连接而成，并由其手性向量 $v = nv_1 + nv_2$ 唯一确定，其中 v_1 和 v_2 是石墨烯片晶格向量，n 是非负整数。设 $m \geq 1$ 和 $n \geq 4$ 为偶数。则一个无封端对称单壁碳纳米管 Y形结由一段扶手椅型 $Y(n,n)$ 和三根相同的单壁扶手椅型碳纳米管 $T_m(n,n)$ 组成，每根长度为 m（层六边形），记作 $Y^m(n,n)$。在 $Y^m(n,n)$ 中，共有 $\frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{2}n + 5$ 个面，包括三个开口（管子与扶手椅型部分连接处），每个开口的手性为 (n,n)，六个七边形，以及 $\frac{3}{4}n^2 - \frac{3}{2}n - 4$ 个六边形。此外，管子 $T_m(n,n)$ 包含 $2mn$ 个六边形面。

令 n、m 和 l 为正整数，且 $m \geq 1$ 和 $n = 2l$，其中 $l \geq 2$。则 $J = J^m(n,n)$ 为 $Y^m(n,n)$ 的 Y 形结图。它包含 $9l^2 - 3l + 2$ 个六边形环和六个七边形。图 J 的阶为 $6l^2 + 18l + 6 + 24ml$，大小为 $9l^2 + 21l + 9 + 36ml$。它有 $6l^2 + 12l + 6 + 24ml$ 个三度顶点和 $12l$ 个二度顶点。注意，图 J 是一个 2- 连通图。

除了 2-连通 Y 形结图 J 外，也考虑了 1-连通Y形结图。这些图通过在 2-连通图 J 的二度顶点上添加悬挂顶点而得到。注意，J 的每个管道都有 $2n$ 个二度顶点。因此，图 J 有 $6n$ 个二度顶点。

将 $2n$ 个悬挂顶点连接到 J 中的任意一根管上所得的图记为 J_1，称为第二类Y形结图。图 J_1 的阶和大小分别为 $6l^2 + 22l + 6 + 24ml$ 和$9l^2 + 25l + 9 + 36ml$。图 J_2 表示将$4n$ 个悬挂顶点连接到 J 中的任意两根管上所得的图，称为第三类 Y 形结点图。J_2中有$6l^2 + 26l + 6 + 24ml$ 个顶点和 $9l^2 + 29l + 9 + 36ml$ 条边。将 $6n$个悬挂顶点连接到 J 的三根管上所得的图记为 J_3，称为第四类 Y 形接合图。它有 $6l^2 + 30l + 6 + 24ml$ 个顶点和 $9l^2 + 33l + 9 + 36ml$ 条边。图1展示了碳纳米管 Y 形结图 J、J_1、J_2和 J_3 。

基于一条边端点的邻域度数和，Y 形结图 J、J_1、J_2 和 J_3 的边划分见表 2。



(a) Y形结图 J　　(b) Y形结图 J_1

(c) Y形结图 J_2　　(d) Y形结图 J_3

Figure 1：对称无封帽单壁扶手椅碳纳米管 Y 形结图

表 2： J、 J_1、 J_2 和 J_3 的边划分

$d_n(u)$ $d_n(v)$	J-频率	J_1-频率	J_2-频率	J_3-频率
(3,7)	0	4l	8l	12l
(5,5)	6l	4l	2l	0
(5,8)	12l	8l	4l	0
(7,7)	0	2l	4l	6l
(7,9)	0	4l	8l	12l
(8,8)	6l	4l	2l	0
(8,9)	12l	8l	4l	0
(9,9)	$9l^2-15l+36ml+9$	$9l^2-9l+36ml+9$	$9l^2-3l+36ml+9$	$9l^2+3l+36ml+9$

5 Y 形结图的 NM 多项式和拓扑指数

本节将推导 Y 形结图的 NM 多项式的一般表达式，并据此求得各种基于邻域度数和的拓扑指数。

定理1。 设 J 为未封端对称单壁扶手椅型碳纳米管的 Y形结图，则

$$NM(J;x,y)=6lx^5y^5+12lx^5y^8+6lx^8y^8+12lx^8y^9+(9l^2-15l+9+36ml)x^9y^9.$$

证明。 无端帽对称单壁扶手椅型碳纳米管的 Y 形结图有 $9l^2+21l+9+36ml$ 条边。令 $E_{(i,j)}$ 为端点的邻域度数和为 i， j的所有边组成的集合，即 $E_{(i,j)}=\{uv\in E(J):\ d_n(u)=i,\ \ d_n(v)=j\}$。

通过对 J进行结构分析， J 的边集可根据端点的邻域度数和划分为以下五个集合:

$E_{(5,5)} = \{uv \in E(J)\colon \ d_n(u) = 5, \ \ d_n(v) = 5\}$, $E_{(5,8)} = \{uv \in E(J)\colon \ d_n(u) = 5, \ \ d_n(v) = 8\}$, $E_{(8,8)} = \{uv \in E(J^m(n, \ n))\colon \ d_n(u) = 8, \ \ d_n(v) = 8\}$, $E_{(8,9)} = \{uv \in E(J)\colon \ d_n(u) = 8, \ \ d_n(v) = 9\}$, $E_{(9,9)} = \{uv \in E(J)\colon \ d_n(u) = 9, \ \ d_n(v) = 9\}$, 以及 $|E_{(5,5)}| = 6l$, $|E_{(5,8)}| = 12l$, $|E_{(8,8)}| = 6l$, $|E_{(8,9)}| = 12l$ $|E_{(9,9)}| = 9l^2 - 15l + 9 + 36ml$ ，。

根据公式（1）， J 的 NM 多项式如下:

$$\begin{aligned} NM(J; x, y) &= \sum_{i \le j} |E_{(i,j)}| x^i y^j \\ &= |E_{(5,5)}| x^5 y^5 + |E_{(5,8)}| x^5 y^8 + |E_{(8,8)}| x^8 y^8 + |E_{(8,9)}| x^8 y^9 + |E_{(9,9)}| x^9 y^9 \\ &= 6l x^5 y^5 + 12l x^5 y^8 + 6l x^8 y^8 + 12l x^8 y^9 + (9l^2 - 15l + 9 + 36ml) x^9 y^9. \end{aligned}$$

□

定理 2. 设 J 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的 Y形结图，则

(i) $NM_1(J) = 162l^2 + 246l + 648ml + 162$*(ii)* $NM_2(J) = 729l^2 + 663l + 2916ml + 729$*(iii)* $NF(J) = 1458l^2 + 1446l + 5832ml + 1458$*(iv)* ${}^{nm}M_2(J) = 0.11l^2 + 0.62l + 0.44ml + 0.11$*(v)* $NR_\alpha(J) = 6l(25^\alpha + 2(40)^\alpha + 64^\alpha + 2(72)^\alpha) + 81^\alpha(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)$ *(vi)* $ND_3(J) = 13122l^2 + 6702l + 52488ml + 13122$*(vii)* $ND_5(J) = 18l^2 + 44.86l + 72ml + 18$*(viii)* $NH(J) = l^2 + 9.69l + 4ml + 1$*(ix)* $NI(J) = 40.5l^2 + 59.24l + 162ml + 40.5$*(x)* $S(J) = 1167.7l^2 + 714.23l + 4670.9ml + 1167.7$.

证明。令 $f(x, \ y) = NM(J; \ x, \ y) = 6lx^5y^5 + 12lx^5y^8 + 6lx^8y^8 + 12lx^8y^9 + (9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$. 则有

$D_x(f(x, y)) = 30lx^5y^5 + 60lx^5y^8 + 48lx^8y^8 + 96lx^8y^9 + 9(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

$D_y(f(x, y)) = 30lx^5y^5 + 96lx^5y^8 + 48lx^8y^8 + 108lx^8y^9 + 9(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

$D_x^2(f(x, y)) = 150lx^5y^5 + 300lx^5y^8 + 384lx^8y^8 + 768lx^8y^9 + 81(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

$D_y^2(f(x, y)) = 150lx^5y^5 + 768lx^5y^8 + 384lx^8y^8 + 972lx^8y^9 + 81(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

$D_xD_y(f(x, \ y)) = 150lx^5y^5 + 480lx^5y^8 + 384lx^8y^8 + 864lx^8y^9 + 81(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

$(D_x + D_y)f(x, y) = 60lx^5y^5 + 156lx^5y^8 + 96lx^8y^8 + 204lx^8y^9 + 18(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$.

$D_xD_y(D_x + D_y)f(x, y) = \ 1500lx^5y^5 + 6240lx^5y^8 + 6144lx^8y^8 + 14688lx^8y^9 + 1458(9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9$.

$(D_x^2 + D_y^2) \ f \ (x, \ y) \ = 300lx^5y^5 + 1068lx^5y^8 + 768lx^8y^8 + 1740lx^8y^9 + 162 \ (9l^2 - 15l + 9 + 36ml) \ x^9y^9$。

$$\begin{aligned} D_x^\alpha D_y^\alpha (f(x, y)) &= 6l(25)^\alpha x^5y^5 + 12l(40)^\alpha x^5y^8 + 6l(64)^\alpha x^8y^8 + 12l(72)^\alpha x^8y^9 + (81)^\alpha \\ &\quad (9l^2 - 15l + 9 + 36ml)x^9y^9. \end{aligned}$$

$S_xS_y\left(f\left(x,\ y\right)\right)=\frac{6l}{25}x^5y^5+\frac{12l}{40}x^5y^8+\frac{6l}{64}x^8y^8+\frac{12l}{72}x^8y^9+\frac{(9l^2-15l+9+36ml)}{81}x^9y^9$。

$S_yD_x+S_xD_y(f(x,y))=12lx^5y^5+\frac{267l}{10}x^5y^8+12lx^8y^8+\frac{145l}{6}x^8y^9+2(9l^2-15l+9+36ml)x^9y^9$。

$2S_xT(f(x,\ y))=\frac{6l}{5}x^{10}+\frac{24l}{13}x^{13}+\frac{3l}{4}x^{16}+\frac{24l}{17}x^{17}+\frac{(9l^2-15l+9+36ml)}{9}x^{18}$。

$S_xTD_xD_y(f(x,\ y))=15lx^{10}+\frac{480l}{13}x^{13}+\frac{384l}{16}x^{16}+\frac{864l}{17}x^{17}+\frac{81}{18}(9l^2-15l+9+36ml)x^{18}$。

$S_x^3Q_{-2}TD_x^3D_y^3(f(x,\ y))=\frac{93750l}{512}x^8+\frac{768000l}{1331}x^{11}+\frac{1572864l}{2744}x^{14}+\frac{4478976l}{3375}x^{15}+\frac{531441}{4096}(9l^2-15l+9+36ml)x^{16}$。

现在，利用表1可得

(i) $NM_1(J)=(D_x+D_y)f(x,y)|_{x=y=1}=162l^2+246l+648ml+162$。

(ii) $NM_2(J)=(D_xD_y)f(x,y)|_{x=y=1}=729l^2+663l+2916ml+729.$

(iii) $NF(J)=(D_x^2+D_y^2)f(x,y)|_{x=y=1}=1458l^2+1446l+5832ml+1458.$

(iv) ${}^{nm}M_2\left(J\right)=\left(S_xS_y\right)f\left(x,\ y\right)|_{x=y=1}=0.11l^2+0.62l+0.44ml+0.11$。

(v) $NR_\alpha(J)=(D_x^\alpha D_y^\alpha)f(x,y)|_{x=y=1}=6l(25^\alpha+2(40)^\alpha+64^\alpha+2(72)^\alpha)+81^\alpha(9l^2-15l+9+36ml)$。

(vi) $ND_3(J)=D_xD_y(D_x+D_y)f(x,\ y)|_{x=y=1}=13122l^2+6702l+52488ml+13122$。

(vii) $ND_5(J)=S_yD_x+S_xD_y(f(x,y))|_{x=y=1}=18l^2+44.86l+72ml+18$。

(viii) $NH(J)=2S_xT(f(x,y))|_{x=y=1}=l^2+9.69l+4ml+1$。

(ix) $NI(J)=S_xTD_xD_y(f(x,\ y))|_{x=y=1}=40.5l^2+59.24l+162ml+40.5$。

(x) $S(J)=S_x^3Q_{-2}TD_x^3D_y^3(f(x,y))|_{x=y=1}=1167.7l^2+714.23l+4670.9ml+1167.7.$ □

定理 3. 设 J_1 为无端帽对称单壁扶手椅型碳纳米管的第二类Y形结图。则

$NM\left(J_1;\ x,y\right)=4lx^3y^7+4lx^5y^5+8lx^5y^8+2lx^7y^7+4lx^7y^9+4lx^8y^8+8lx^8y^9+\left(9l^2-9l+9+36ml\right)x^9y^9.$

证明。无端帽对称单壁扶手椅型碳纳米管的第二类Y形结图有 $9l^2+25l+9+36ml$ 条边。令 $E_{(i,j)}$ 为端点的邻域度数和为 $i,\ j$ 的所有边组成的集合，即 $E_{(i,j)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=i,\ \ d_n(v)=j\}$。

通过对 J_1 的结构分析， J_1 的边集可根据端点的邻域度数和划分为八个集合，如下所示:

$E_{(3,7)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=3,\ \ d_n(v)=7\}$, $E_{(5,5)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=5,\ \ d_n(v)=5\}$, $E_{(5,8)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=5,\ \ d_n(v)=8\}$, $E_{(7,7)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=7,\ \ d_n(v)=7\}$, $E_{(7,9)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=7,\ \ d_n(v)=9\}$, $E_{(8,8)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=8,\ \ d_n(v)=8\}$, $E_{(8,9)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=8,\ \ d_n(v)=9\}$, $E_{(9,9)}=\{uv\in E(J_1):\ d_n(u)=9,\ \ d_n(v)=9\}$, 以及 $|E_{(3,7)}|=4l$、 $|E_{(5,5)}|=4l$、 $|E_{(5,8)}|=8l$、 $|E_{(7,7)}|=2l$、 $|E_{(7,9)}|=4l$、 $|E_{(8,8)}|=4l$、 $|E_{(8,9)}|=8l$、 $|E_{(9,9)}|=9l^2-9l+9+36ml$ 。

由公式（1）可得 J_1 的 NM 多项式如下:

$$\begin{aligned}NM(J_1;x,y) &= \sum_{i\le j}|E_{(i,j)}|x^iy^j\\ &= |E_{(3,7)}|x^3y^7+|E_{(5,5)}|x^5y^5+|E_{(5,8)}|x^5y^8+|E_{(7,7)}|x^7y^7+|E_{(7,9)}|x^7y^9+\\ &\quad |E_{(8,8)}|x^8y^8+|E_{(8,9)}|x^8y^9+|E_{(9,9)}|x^9y^9\\ &= 4lx^3y^7+4lx^5y^5+8lx^5y^8+2lx^7y^7+4lx^7y^9+4lx^8y^8+8lx^8y^9+\\ &\quad (9l^2-9l+9+36ml)x^9y^9.\end{aligned}$$

□

定理 4。 设 J_1 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的第二类Y形结图。则

(i) $NM_1(J_1) = 162l^2 + 314l + 648ml + 162$*(ii)* NM_2
$(J_1) = 729l^2 + 957l + 2916ml + 729$*(iii)* $NF(J_1)$
$= 1458l^2 + 2074l + 5832ml + 1458$*(iv)* ${}^{nm}M_2(J_1)$
$= 0.11l^2 + 0.72l + 0.44ml + 0.11$*(vi)* $ND_3(J_1)$
$= 13122l^2 + 12170l + 52488ml + 13122$

$$(v)\ NR_\alpha(J_1) = 2l(2(21)^\alpha + 2(25)^\alpha + 4(40)^\alpha + (49)^\alpha + 2(63)^\alpha + 2(64)^\alpha + 4(72)^\alpha) + (81)^\alpha(9l^2 - 9l + 9 + 36ml)$$

(vii) $ND_5(J_1) = 18l^2 + 56.328l + 72ml + 18$

(viii) $NH(J_1) = l^2 + 3.98l + 4ml + 1$

(ix) $NI\ (J_1) = 40.5l^2 + 75.15l + 162ml + 40.5$*(x)*
$S\ (J_1) = 1167.7l^2 + 1178.92l + 4670.9ml + 1167.7$。

证明。 证明参见定理 2。 □

定理 5。 令 J_2 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的第三类 *Y* 形结点图。则

$$NM(J_2; x, y) = 8lx^3y^7 + 2lx^5y^5 + 4lx^5y^8 + 4lx^7y^7 + 8lx^7y^9 + 2lx^8y^8 + 4lx^8y^9 + (9l^2 - 3l + 9 + 36ml)x^9y^9.$$

证明。 无端帽对称单壁扶手椅型碳纳米管的第三类 Y 形结图具有 $9l^2 + 29l + 9 + 36ml$ 条边。令 $E_{(i,j)}$ 为所有端点邻域度数和为 i, j 的边集，即 $E_{(i,j)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = i,\ \ d_n(v) = j\}$。

通过对 J_2的结构分析， J_2 的边集可根据端点的邻域度数和划分为以下八个集合:

$E_{(3,7)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 3,\ \ d_n(v) = 7\}$, $E_{(5,5)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 5,\ \ d_n(v) = 5\}$,
$E_{(5,8)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 5,\ \ d_n(v) = 8\}$, $E_{(7,7)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 7,\ \ d_n(v) = 7\}$,
$E_{(7,9)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 7,\ \ d_n(v) = 9\}$, $E_{(8,8)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 8,\ \ d_n(v) = 8\}$,
$E_{(8,9)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 8,\ \ d_n(v) = 9\}$, $E_{(9,9)} = \{uv \in E(J_2)\colon\ d_n(u) = 9,\ \ d_n(v) = 9\}$, 以及
$|E_{(3,7)}| = 8l$、 $|E_{(5,5)}| = 2l$、 $|E_{(5,8)}| = 4l$、 $|E_{(7,7)}| = 4l$、 $|E_{(7,9)}| = 8l$、 $|E_{(8,8)}| = 2l$、 $|E_{(8,9)}| = 4l$、
$|E_{(9,9)}| = 9l^2 - 3l + 9 + 36ml$ 。

由公式（1），可得 J_2 的 NM 多项式如下:

$$\begin{aligned} NM(J_2; x, y) &= \sum_{i \le j} |E_{(i,j)}| x^i y^j \\ &= |E_{(3,7)}|x^3y^7 + |E_{(5,5)}|x^5y^5 + |E_{(5,8)}|x^5y^8 + |E_{(7,7)}|x^7y^7 + |E_{(7,9)}|x^7y^9 + \\ &\quad |E_{(8,8)}|x^8y^8 + |E_{(8,9)}|x^8y^9 + |E_{(9,9)}|x^9y^9 \\ &= 8lx^3y^7 + 2lx^5y^5 + 4lx^5y^8 + 4lx^7y^7 + 8lx^7y^9 + 2lx^8y^8 + 4lx^8y^9 + \\ &\quad (9l^2 - 3l + 9 + 36ml)x^9y^9. \end{aligned}$$

□

定理 6. 设 J_2 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的第三类 *Y* 形结点图，则

(i) $NM_1(J_2) = 162l^2 + 382l + 648ml + 162$*(ii)*
$NM_2(J_2) = 729l^2 + 1251l + 2916ml + 729$*(iii)*
$NF(J_2) = 1458l^2 + 2478l + 5832ml + 1458$*(iv)* ${}^{nm}M_2(J_2) = 0.11l^2 + 0.819l + 0.44ml + 0.11$

(v) $NR_\alpha(J_2) = 2l(4(21)^\alpha+(25)^\alpha+2(40)^\alpha+2(49)^\alpha+4(63)^\alpha+(64)^\alpha+2(72)^\alpha)+(81)^\alpha(9l^2-3l+9+36ml)$
(vi) $ND_3(J_2) = 13122l^2 + 17638l + 52488ml + 13122$

(vii) $ND_5(J_2) = 18l^2 + 65.56l + 72ml + 18$

(viii) $NH(J_2) = l^2 + 4.57l + 4ml + 1$

(ix) $NI(J_2) = 40.5l^2 + 91.048l + 162ml + 40.5$

(x) $S(J_2) = 1167.7l^2 + 1643.61l + 4670.9ml + 1167.7.$

证明。 证明见定理 2。 □

定理 7。 令 J_3 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的第四类 Y 形接合图。则

$NM(J_3; x, y) = 12lx^3y^7 + 6lx^7y^7 + 12lx^7y^9 + (9l^2 + 3l + 9 + 36ml)x^9y^9$。

证明。 未封端对称单壁扶手椅型碳纳米管的第四类 Y 形接合图有 $9l^2 + 33l + 9 + 36ml$ 条边。令 $E_{(i,j)}$ 为所有端点邻域度数和为 i, j 的边的集合，即 $E_{(i,j)} = \{uv \in E(J_3) : d_n(u) = i, \quad d_n(v) = j\}$。

通过对 J_3 进行结构分析， J_3 的边集可根据端点的邻域度数和划分为以下四个集合:

$E_{(3,7)} = \{uv \in E(J_3) : d_n(u) = 3, \quad d_n(v) = 7\}$, $E_{(7,7)} = \{uv \in E(J_3) : d_n(u) = 7, \quad d_n(v) = 7\}$, $E_{(7,9)} = \{uv \in E(J_3) : d_n(u) = 7, \quad d_n(v) = 9\}$, $E_{(9,9)} = \{uv \in E(J_3) : d_n(u) = 9, \quad d_n(v) = 9\}$, 以及 $|E_{(3,7)}| = 12l$, $|E_{(7,7)}| = 6l$, $|E_{(9,9)}| = 12l$, $|E_{(9,9)}| = 9l^2 + 3l + 9 + 36ml$。

由公式（1）可得 J_3 的 NM 多项式如下:

$$\begin{aligned} NM(J_3; x, y) &= \sum_{i \le j} |E_{(i,j)}| x^i y^j \\ &= |E_{(3,7)}| x^3y^7 + |E_{(7,7)}| x^7y^7 + |E_{(7,9)}| x^7y^9 + |E_{(9,9)}| x^9y^9 \\ &= 12lx^3y^7 + 6lx^7y^7 + 12lx^7y^9 + (9l^2 + 3l + 9 + 36ml)x^9y^9. \end{aligned}$$

□

定理 8. 设 J_3 为无端帽对称单壁扶手椅碳纳米管的第四类 Y 形接合图。则

(i) $NM_1(J_3) = 162l^2 + 450l + 648ml + 162$ *(ii)* $NM_2(J_3)$
$= 729l^2 + 1545l + 2916ml + 729$ *(iii)* $NF(J_3)$
$= 1458l^2 + 3330l + 5832ml + 1458$ *(iv)* ${}^{nm}M_2(J_3)$
$= 0.11l^2 + 0.92l + 0.44ml + 0.11$ *(v)* $NR_\alpha(J_3) = 6l(2(21)^\alpha + (49)^\alpha + 2$
$(63)^\alpha) + (81)^\alpha(9l^2 + 3l + 9 + 36ml)$ *(vi)* $ND_3(J_3)$
$= 13122l^2 + 23106l + 52488ml + 13122$ *(vii)* $ND_5(J_3)$
$= 18l^2 + 75.90l + 72ml + 18$ *(viii)* $NH(J_3) = l^2 + 5.090l + 4ml + 1$ *(ix)*
$NI(J_3) = 40.5l^2 + 106.95l + 162ml + 40.5$ *(x)* $S(J_3)$
$= 1167.7l^2 + 2085.95l + 4670.9ml + 1167.7.$

证明。 证明请参见定理 2。 □

6 Y 形结图的图指标熵

本节中，我们根据基于邻域度和的拓扑指数，计算碳纳米管 Y 形结的指标熵。首先，我们计算 Y形结图 J 的指标熵，其边划分见表 2。

- **J的第三类 Zagreb 指数熵**

由定理 2 的（i）部分可得

$$NM_1(J) = 162l^2 + 246l + 648ml + 162. \tag{19}$$

现在，根据方程（4）， J 的第三类 Zagreb 指数熵为

$$H_{\beta_1}(J) = log(NM_1(J)) - \frac{1}{NM_1(J)} \sum_{e \in E(J)} \beta_1(e) log \beta_1(e). \tag{20}$$

将表 2 和方程（19）代入方程（20），可得所需的 J 第三类 Zagreb 指数熵如下:

$$\begin{aligned}
H_{\beta_1}(J) &= log(NM_1(J)) - \frac{1}{NM_1(J)} \sum_{e \in E(J)} \beta_1(e) log \beta_1(e) \\
&= log(162l^2 + 246l + 648ml + 162) - \frac{1}{162l^2 + 246l + 648ml + 162} \Big(6l(10)(log10) + \\
&\quad 12l(13)(log13) + 6l(16)(log16) + 12l(17)(log17) + (9l^2 - 15l + 36ml + 9)(18)(log18) \Big) \\
&= log(162l^2 + 246l + 648ml + 162) - \frac{1}{162l^2 + 246l + 648ml + 162} \Big(60l(log10) + \\
&\quad 156l(log13) + 96l(log16) + 204l(log17) + (162l^2 - 270l + 648ml + 162)(log18) \Big) \\
&= log(162l^2 + 246l + 648ml + 162) - \frac{1}{162l^2 + 246l + 648ml + 162} \Big(60l(1) + 156l(1.1139433523) \\
&\quad + 96l(1.2041199827) + 204l(1.2304489214) + (162l^2 - 270l + 648ml + 162)(1.2552725051) \Big) \\
&\quad \approx log(162l^2 + 246l + 648ml + 162) - \frac{202.5l^2 + 261.78l + 810ml + 202.5}{162l^2 + 246l + 648ml + 162}.
\end{aligned}$$

- **J的邻域第二 Zagreb 指数熵**

根据定理 2 的（ii）部分，我们有

$$NM_2(J) = 729l^2 + 663l + 2916ml + 729. \tag{21}$$

利用表 2 中给出的数值，并将方程（21）代入方程（6），可得所需的 J 邻域第二扎格雷布指数熵如下:

$$\begin{aligned}
H_{\beta_2}(J) &= log(NM_2(J)) - \frac{1}{NM_2(J)} \sum_{e \in E(J)} \beta_2(e) log \beta_2(e) \\
&= log(729l^2 + 663l + 2916ml + 729) - \frac{1}{729l^2 + 663l + 2916ml + 729} \Big(6l(25)(log25) + \\
&\quad 12l(40)(log40) + 6l(64)(log64) + 12l(72)(log72) + (9l^2 - 15l + 36ml + 9)(81)(log81) \Big) \\
&\quad \approx log(729l^2 + 663l + 2916ml + 729) - \frac{1391.22l^2 + 958.27l + 5564.88ml + 1391.22}{729l^2 + 663l + 2916ml + 729}.
\end{aligned}$$

同样，我们计算了 J 的其余指标熵。表 3 展示了 J 的一些已计算图指标熵。

由此，计算出 Y 形结图 J_1、 J_2 和 J_3 的基于拓扑指数的熵。

J_1 J_2 和 J_3 的基于指数的熵列于表4、表5和表6中。

表3： J的指标熵

熵	熵值
$H_{\beta_3}(J)$	$\log(1458l^2+1446l+5832ml+1458)\ -\ \frac{3221.62l^2+2601.62l+12885.84ml+3221.46}{1458l^2+1446l+5832ml+1458}$
$H_{\beta_4}(J)$	$\log(0.11l^2+0.62l+0.44ml+0.11)+\frac{0.207l^2+0.92l+0.828ml+0.207}{0.11l^2+0.62l+0.44ml+0.11}$
$H_{\beta_5}(J)$	$\log(13122l^2+12170l+52488ml+13122)\ -\frac{41514.75l^2+15202.13l+166059.31ml+41514.75}{13122l^2+12170l+52488ml+13122}$
$H_{\beta_6}(J)$	$\log(18l^2+44.86l+72ml+18)\ -\ \frac{5.41l^2+14.81l+21.67ml+5.41}{18l^2+44.86l+72ml+18}$
$H_{\beta_7}(J)$	$\log(l^2+9.69l+4ml+1)+\frac{0.95l^2+2.72l+3.81ml+0.95}{l^2+9.69l+4ml+1}$
$H_{\beta_8}(J)$	$\log(40.5l^2+59.24l+162ml+40.5)\ -\frac{26.45l^2+26.18l+105.82ml+26.45}{40.5l^2+59.24l+162ml+40.5}$

表4： J_1的指标熵

熵	熵值
$H_{\beta_1}(J_1)$	$\log(162l^2+314l+648ml+162)\ -\frac{203.31l^2+346.09l+813.24ml+203.31}{162l^2+314l+648ml+162}$
$H_{\beta_2}(J_1)$	$\log(729l^2+957l+2916ml+729)\ -\ \frac{1391.22l^2+1523.54l+5564.88ml+1391.22}{729l^2+957l+2916ml+729}$
$H_{\beta_3}(J_1)$	$\log(1458l^2+2074l+5832ml+1458)\ -\ \frac{3221.46l^2+3991l+12885.84ml+3221.46}{1458l^2+2074l+5832ml+1458}$
$H_{\beta_4}(J_1)$	$\log(0.11l^2+0.72l+0.44ml+0.11)+\frac{0.207l^2+1.065l+0.897ml+0.207}{0.11l^2+0.72l+0.44ml+0.11}$
$H_{\beta_5}(J_1)$	$\log(13122l^2+12170l+52488ml+13122)\ -\frac{41514.75l^2+32699.53l+166059ml+41514.75}{13122l^2+12170l+52488ml+13122}$
$H_{\beta_6}(J_1)$	$\log(18l^2+56.328l+72ml+18)\ -\ \frac{5.41l^2+19.09l+21.67ml+5.41}{18l^2+56.328l+72ml+18}$
$H_{\beta_7}(J_1)$	$\log(l^2+3.98l+4ml+1)+\frac{0.9l^2+3.21l+3.6ml+0.9}{l^2+3.98l+4ml+1}$
$H_{\beta_8}(J_1)$	$\log(40.5l^2+75.15l+162ml+40.5)\ -\frac{26.37l^2+36.84l+105.48ml+26.37}{40.5l^2+75.15l+162ml+40.5}$

表5： J_2的指标熵

熵	熵值
$H_{\beta_1}(J_2)$	$\log(162l^2+382l+648ml+162)\ -\frac{203.31l^2+430.65l+813.24ml+203.31}{162l^2+382l+648ml+162}$
$H_{\beta_2}(J_2)$	$\log(729l^2+1251l+2916ml+729)\ -\ \frac{1391.22l^2+2088.77l+5564.88ml+1391.22}{729l^2+1251l+2916ml+729}$
$H_{\beta_3}(J_2)$	$\log(1458l^2+2478l+5832ml+1458)\ -\ \frac{3221.46l^2+5380.37l+12885.84ml+3221.46}{1458l^2+2478l+5832ml+1458}$
$H_{\beta_4}(J_2)$	$\log(0.11l^2+0.819l+0.44ml+0.11)+\frac{0.099l^2+1.007l+0.396ml+0.099}{0.11l^2+0.819l+0.44ml+0.11}$
$H_{\beta_5}(J_2)$	$\log(13122l^2+17638l+52488ml+13122)\ -\frac{41514.75l^2+50196.95l+166059ml+50196.95}{13122l^2+17638l+52488ml+13122}$
$H_{\beta_6}(J_2)$	$\log(18l^2+65.56l+72ml+18)\ -\ \frac{5.41l^2+23.44l+21.67ml+5.41}{18l^2+65.56l+72ml+18}$
$H_{\beta_7}(J_2)$	$\log(l^2+4.57l+4ml+1)+\frac{0.9l^2+3.61l+3.6ml+0.9}{l^2+4.57l+4ml+1}$
$H_{\beta_8}(J_2)$	$\log(40.5l^2+91.048l+162ml+40.5)\ -\frac{26.37l^2+46.387l+105.48ml+26.37}{40.5l^2+91.048l+162ml+40.5}$

表 6： J_3的指标熵

熵	熵值
$H_{\beta_1}(J_3)$	$\log(162l^2+450l+648ml+162)\ -\frac{203.31l^2+515.23l+813.24ml+203.31}{162l^2+450l+648ml+162}$
$H_{\beta_2}(J_3)$	$\log(729l^2+1545l+2916ml+729)\ -\ \frac{1391.22l^2+2654.14l+5564.88ml+1391.22}{729l^2+1545l+2916ml+729}$
$H_{\beta_3}(J_3)$	$\log(1458l^2+3330l+5832ml+1458)\ -\ \frac{3221.46l^2+6769.75l+12885.84ml+3221.46}{1458l^2+3330l+5832ml+1458}$
$H_{\beta_4}(J_3)$	$\log(0.11l^2+0.92l+0.44ml+0.11)+\frac{0.18l^2+1.35l+0.72ml+0.18}{0.11l^2+0.92l+0.44ml+0.11}$
$H_{\beta_5}(J_3)$	$\log(13122l^2+23106l+52488ml+13122)\ -\frac{41514.75l^2+67694.4l+166059ml+41514}{13122l^2+23106l+52488ml+13122}$
$H_{\beta_6}(J_3)$	$\log(18l^2+75.90l+72ml+18)\ -\ \frac{5.41l^2+27.79l+21.67ml+5.41}{18l^2+75.90l+72ml+18}$
$H_{\beta_7}(J_3)$	$\log(l^2+5.090l+4ml+1)+\frac{0.9l^2+4.04l+3.6ml+0.9}{l^2+5.090l+4ml+1}$
$H_{\beta_8}(J_3)$	$\log(40.5l^2+106.95l+162ml+40.5)\ -\frac{26.37l^2+56.44l+105.48ml+26.37}{40.5l^2+106.95l+162ml+40.5}$

7 数值结果与讨论

本节计算了若干 l 和 m 取值下 Y 形结图的拓扑指数和图指标熵的数值。此外，我们绘制了折线图和柱状图，以便比较所得结果。这里，计算采用以10为底的对数。

Y形结图 J 的拓扑指数数值列于表7中。表7中的对数值绘制于图2中。从图2的纵轴可以得出，对于Y形结图 J，拓扑指数的阶为： ${}^{nm}M_2 \leq NR_{-1/2} \leq NH \leq ND_5 \leq NI \leq NM_1 \leq NM_2 \leq S \leq NF \leq ND_3$。与其他拓扑指数相比，第三 NDe 指数占据主导地位，而邻域第二修正 Zagreb 指数增长缓慢。

表7：Y形结图 J的拓扑指数数值

$[l,m]$	$NM_1(J)$	$NM_2(J)$	$NF(J)$	${}^{nm}M_2(J)$	$NR_{-\frac{1}{2}}(J)$	$ND_3(J)$	$ND_5(J)$	$NH(J)$	$NI(J)$	$S(J)$
[2,2]	3894	16635	33510	3.55	20.7436	288966	467.72	40.38	968.92	25950.56
[3,3]	8190	35523	71406	6.92	45.27693	623718	962.58	75.07	2040.63	55857.79
[4,4]	14106	61701	123882	11.39	79.81026	1089690	1637.44	119.76	3517.34	97442.22
[5,5]	21642	95169	190938	16.96	124.3436	1686882	2492.3	174.45	5399.05	150703.9
[6,6]	30798	135927	272574	23.63	178.8769	2415294	3527.16	239.14	7685.76	215642.7
[7,7]	41574	183975	368790	31.4	243.4103	3274926	4742.02	313.83	10377.47	292258.7
[8,8]	53970	239313	479586	40.27	317.9436	4265778	6136.88	398.52	13474.18	380551.9
[9.9]	67986	301941	604962	50.24	440.4769	5387850	7711.74	493.21	16975.89	480522.4
[10,10]	83622	371859	744918	61.31	497.0103	6641142	9466.6	597.9	20882.6	592170

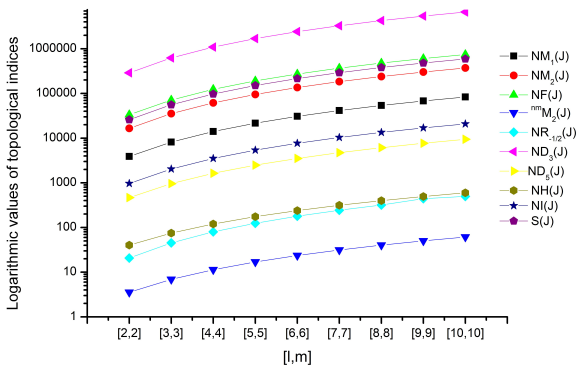


图2：Y形结图的拓扑指数图形比较 J

表8展示了Y形结图 J_1的一些拓扑指数数值。这些拓扑指数的对数值绘制于图3中。从图3可以得出，Y形结图 J_1 的拓扑指数阶为： ${}^{nm}M_2 \leq NH \leq NR_{-1/2} \leq ND_5 \leq NI \leq NM_1 \leq NM_2 \leq S \leq NF \leq ND_3$。此外，我们还可以看到，对于 J_1，$NR_{-1/2}$ 和 NH的对数值几乎相同。

表8：Y形结图拓扑指数的数值 J_1

$[l,m]$	$NM_1(J_1)$	$NM_2(J_1)$	$NF(J_1)$	${}^{nm}M_2(J_1)$	$NR_{-\frac{1}{2}}(J_1)$	$ND_3(J_1)$	$ND_5(J_1)$	$NH(J_1)$	$NI(J_1)$	$S(J_1)$
[2,2]	4030	17223	35166	3.75	29.34052	299902	490.656	28.96	1000.8	26879.94
[3,3]	8394	36405	74190	7.22	58.51078	640122	996.984	57.94	2088.45	57251.86
[4,4]	14378	62877	127994	11.79	97.68103	1111562	1683.312	96.92	3581.1	99300.98
[5,5]	21982	96639	196578	17.46	146.8513	1714222	2549.64	145.9	5478.75	153027.3
[6,6]	31206	137691	279942	24.23	206.0216	2448102	3595.968	204.88	7781.4	218430.8
[7,7]	42050	186033	378086	32.1	275.1918	3313202	4822.296	273.86	10489.05	295511.5
[8,8]	54514	241665	491010	41.07	354.3621	4309522	6228.624	352.84	13601.7	384269.5
[9,9]	68598	304587	618714	51.14	443.5323	5437062	7814.952	441.82	17119.35	484704.6
[10,10]	84302	374799	761198	62.31	542.7026	6695822	9581.28	540.8	21042	596816.9

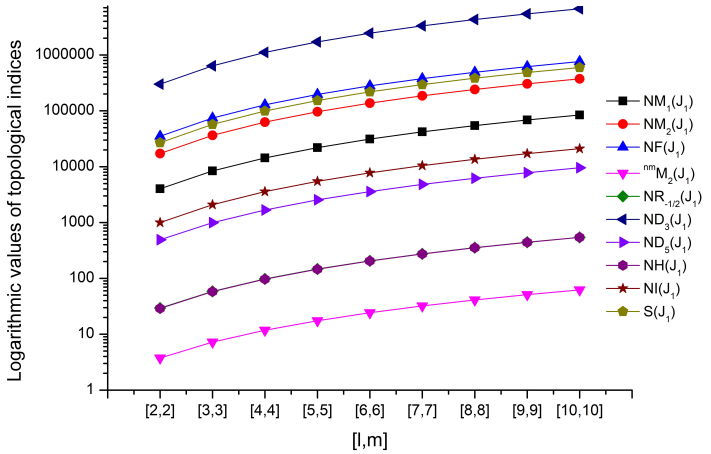


图3：Y形结图拓扑指数的图形比较 J_1

表9展示了Y形结图 J_2的一些拓扑指数计算值。这些指数的对数值绘于图4中。图4的纵轴清晰地展示了这种比较。图4显示，与 J_2的其他拓扑指数相比， ND_3 的对数值极高。从图4可以看出，$NR_{-1/2}$ 和NH 的图几乎重合。

表9：Y形结图拓扑指数的数值 J_2

$[l,m]$	$NM_1(J_2)$	$NM_2(J_2)$	$NF(J_2)$	${}^{nm}M_2(J_2)$	$NR_{-\frac{1}{2}}(J_2)$	$ND_3(J_2)$	$ND_5(J_2)$	$NH(J_2)$	$NI(J_2)$	$S(J_2)$
[2,2]	4166	17811	35574	3.948	30.49121	310838	509.12	30.14	1032.596	27809.32
[3,3]	8598	37287	74502	7.517	60.23681	656526	1024.68	59.71	2136.144	58645.93
[4,4]	14650	64053	128010	12.186	99.98241	1133434	1720.24	99.28	3644.692	101159.7
[5,5]	22322	98109	196098	17.955	149.728	1741562	2595.8	148.85	5558.24	155350.8
[6,6]	31614	139455	278766	24.824	209.2192	2480910	3651.36	208.42	7876.788	221219
[7,7]	42526	188091	376014	32.793	279.2192	3351478	4886.92	277.99	10600.34	298764.4
[8,8]	55058	244017	487842	41.862	358.9648	4353266	6302.48	357.56	13728.88	387987
[9,9]	69210	307233	614250	52.031	448.7104	5486274	7898.48	447.13	17262.43	488886.8
[10,10]	84982	377739	755238	63.3	548.456	6750502	9673.6	546.7	21200.98	601463.8

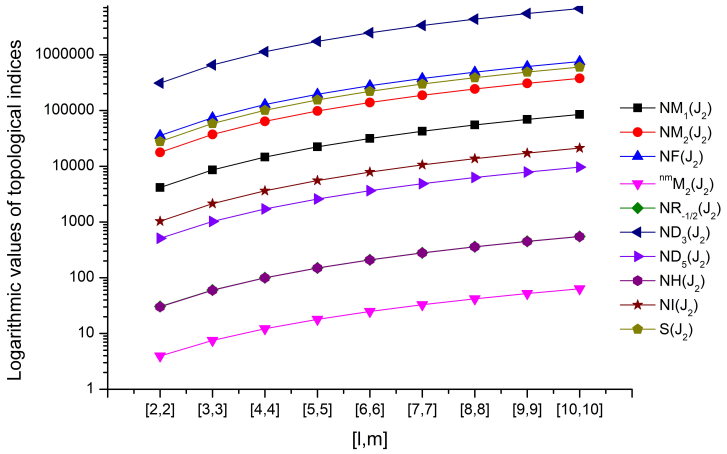


图4：Y 形结 J_2的拓扑指数图形比较

表10展示了Y 形结 J_3的一些拓扑指数数值。图5对这些指数进行了图形比较。表10和图5显示，随着 l 和 m 的值增加，拓扑指数的值严格递增。

从表7、表8、表9和表10可以看出，随着Y形结图中 l 和 m 的值增加，相应拓扑指数的数值增长非常迅速。

表10：Y形结图 J_3的拓扑指数数值

$[l,m]$	$NM_1(J_3)$	$NM_2(J_3)$	$NF(J_3)$	$^mM_2(J_3)$	$NR_{-\frac{1}{2}}(J_3)$	$ND_3(J_3)$	$ND_5(J_3)$	$NH(J_3)$	$NI(J_3)$	$S(J_3)$
[2,2]	4302	18399	37278	4.15	31.6419	321774	529.8	31.18	1064.4	28694
[3,3]	8802	38169	77058	7.82	61.9628	672930	1055.7	61.27	2183.85	59973
[4,4]	14922	65229	131418	12.59	102.284	1155306	1761.6	101.36	3708.3	102929
[5,5]	22662	99579	200358	18.46	152.605	1768902	2647.5	151.45	5637.75	157562
[6,6]	32022	141219	283878	25.43	212.926	2513718	3713.4	211.54	7972.2	223873
[7,7]	43002	190149	381978	33.5	283.247	3389754	4959.3	281.63	10711.7	301861
[8,8]	55602	246369	494658	42.67	363.568	4397010	6385.2	361.72	13856.1	391526
[9,9]	69822	309879	621918	52.94	453.889	5535486	7991.1	451.81	17405.6	492868
[10,10]	85662	380679	763758	64.31	554.209	6805182	9777	551.9	21360	605887

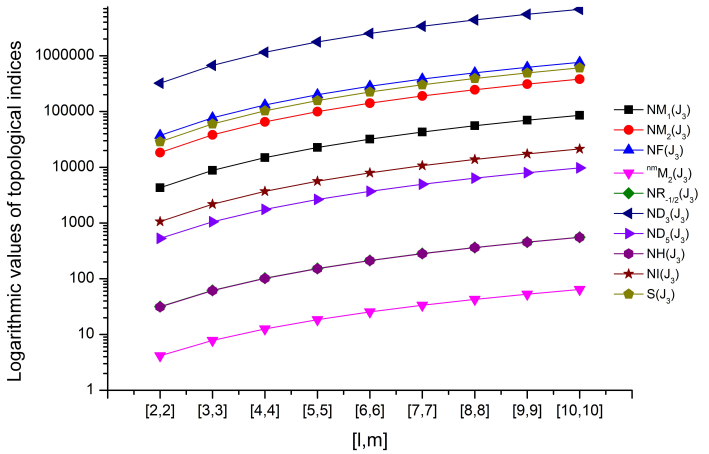


图5：Y形结图的拓扑指数图形比较 J_3

Y形结图 J 的一些图指标熵值列于表11，并在图6中进行了展示。从图6可以看出， H_{β_1}、 H_{β_2}、 H_{β_3}和 H_{β_8} 的熵度量几乎

一致。

表11： J的指标熵数值

$[l,m]$	$H_{\beta_1}(J)$	$H_{\beta_2}(J)$	$H_{\beta_3}(J)$	$H_{\beta_4}(J)$	$H_{\beta_5}(J)$	$H_{\beta_6}(J)$	$H_{\beta_7}(J)$	$H_{\beta_8}(J)$
[2,2]	2.363878	2.349537	2.351098	2.293045	2.469266	1.849911	2.235934	2.358964
[3,3]	2.680031	2.668041	2.669162	2.614962	2.751708	2.162725	2.567487	2.674998
[4,4]	2.912369	2.901799	2.902659	2.851695	2.966026	2.393078	2.813031	2.907277
[5,5]	3.09586	3.086229	3.086919	3.038506	3.138274	2.575276	3.00722	3.090734
[6,6]	3.24743	3.238462	3.239031	3.192634	3.28218	2.725919	3.167437	3.242282
[7,7]	3.37652	3.368045	3.368525	3.323745	3.40572	2.85433	3.303596	3.371357
[8,8]	3.488993	3.480834	3.481247	3.437785	3.51397	2.966216	3.421864	3.483755
[9.9]	3.588472	3.580678	3.581037	3.538669	3.610178	3.065343	3.526328	3.583289
[10,10]	3.677788	3.670239	3.670554	3.629107	3.696846	3.154321	3.61983	3.672599

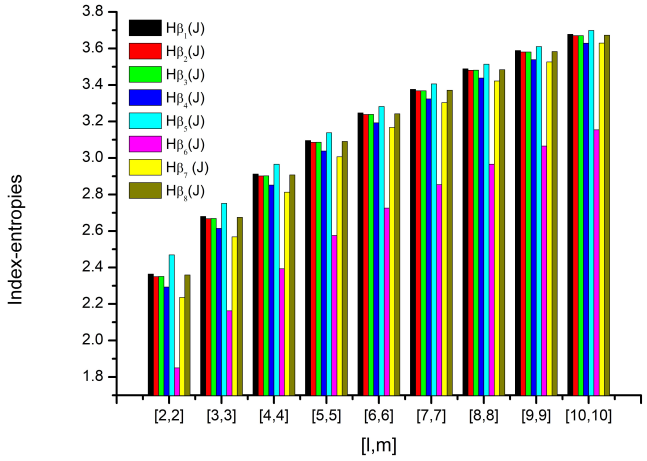


图6：J的指标熵图形比较

Y形结图 J_1 的指标熵值列于表12，并在图7中进行了展示。从表12和图7可以看出， H_{β_1}、H_{β_2}、 H_{β_3}、 H_{β_5}、H_{β_6} 和 H_{β_1} 的图指标熵度量几乎相同。

表12： J_1的指标熵数值

$[l,m]$	$H_{\beta_1}(J_1)$	$H_{\beta_2}(J_1)$	$H_{\beta_3}(J_1)$	$H_{\beta_4}(J_1)$	$H_{\beta_5}(J_1)$	$H_{\beta_6}(J_1)$	$H_{\beta_7}(J_1)$	$H_{\beta_8}(J_1)$
[2,2]	2.374116	2.362875	2.365677	2.37483	2.351939	2.381171	2.336108	2.373399
[3,3]	2.686117	2.677718	2.679751	2.705906	2.66972	2.691361	2.643717	2.686081
[4,4]	2.916047	2.909359	2.91094	2.948613	2.903076	2.92019	2.871061	2.916411
[5,5]	3.097981	3.092424	3.093709	3.139639	3.087253	3.101393	3.051307	3.098605
[6,6]	3.248463	3.243705	3.244784	3.2969	3.239312	3.251355	3.200605	3.24927
[7,7]	3.376753	3.372588	3.373514	3.430435	3.368768	3.379258	3.23802	3.377694
[8,8]	3.488549	3.484842	3.485651	3.546395	3.481462	3.490754	3.439143	3.489594
[9.9]	3.587606	3.584263	3.584979	3.648847	3.58132	3.589572	3.537668	3.588733
[10,10]	3.676529	3.673482	3.674123	3.740586	3.6707383	3.6783	3.626158	3.677722

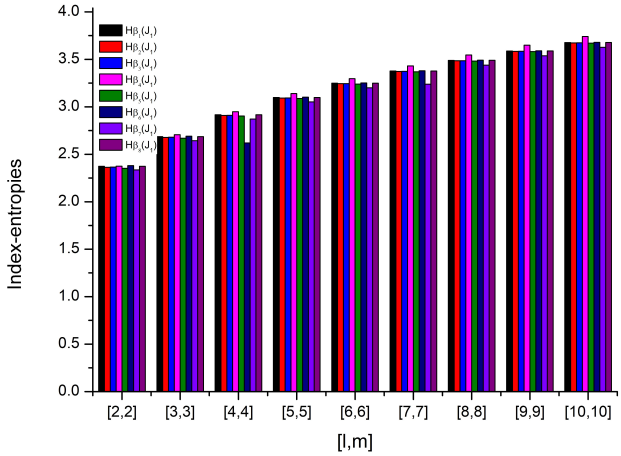


图7： J_1的指标熵图形比较

表13展示了Y形结图 J_2的一些图指标熵。Y形结图 J_2 的指标熵图形比较如图8所示。从图8中可以看出， J_2 的图指标熵随着 l 和 m 的值增大而增大。

表13： J_2的指标熵数值

$[l,m]$	$H_{\beta_1}(J_2)$	$H_{\beta_2}(J_2)$	$H_{\beta_3}(J_2)$	$H_{\beta_4}(J_2)$	$H_{\beta_5}(J_2)$	$H_{\beta_6}(J_2)$	$H_{\beta_7}(J_2)$	$H_{\beta_8}(J_2)$
[2,2]	2.388128	2.375827	2.346955	1.633105	2.336917	2.391354	2.345766	2.35432
[3,3]	2.696411	2.687189	2.666479	1.88376	2.665889	2.698832	2.650775	2.672367
[4,4]	2.924151	2.916793	2.9007	2.074455	2.902766	2.926068	2.876596	2.905747
[5,5]	3.104655	3.098533	3.085384	2.229346	3.088295	3.106231	3.055853	3.089892
[6,6]	3.254134	3.248888	3.237774	2.360107	3.240916	3.255465	3.204459	3.241908
[7,7]	3.381681	3.377087	3.367462	2.473394	3.370602	3.3882828	3.331363	3.371323
[8,8]	3.492905	3.488816	3.480327	2.573399	3.48337	3.49391	3.442095	3.483978
[9.9]	3.59151	3.587821	3.580028	2.662948	3.583139	3.592399	3.540309	3.583714
[10,10]	3.680065	3.676703	3.659833	2.744042	3.672602	3.680861	3.628548	3.673185

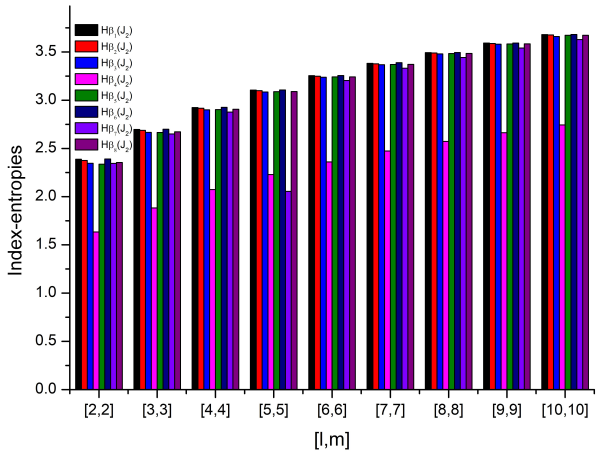


图8： J_2各指标熵的图形比较

在表14中，我们计算了Y形结图 J_3的一些图指标熵。图9展示了 J_3的指标熵之间的图形比较。从表14和图9可以看出， J_3 的指标熵 H_{β_1}、 H_{β_2}、 H_{β_3}、 H_{β_6}和 H_{β_8} 几乎相同。此外，表11、表12、表13和表14表明，Y形结图的图指标熵会随着 l 和 m 的值增大而增大。

表14： J_3的指标熵数值

$[l,m]$	$H_{\beta_1}(J_3)$	$H_{\beta_2}(J_3)$	$H_{\beta_3}(J_3)$	$H_{\beta_4}(J_3)$	$H_{\beta_5}(J_3)$	$H_{\beta_6}(J_3)$	$H_{\beta_7}(J_3)$	$H_{\beta_8}(J_3)$
[2,2]	2.401692	2.388393	2.393488	2.179494	1.755856	2.404539	2.359174	2.40079
[3,3]	2.706459	2.696449	2.7002	2.469933	2.242514	2.708584	2.660759	2.70624
[4,4]	2.932101	2.924095	2.927043	2.687	2.571439	2.933776	2.884517	2.932298
[5,5]	3.11224	3.104551	3.106972	2.86049	2.816575	3.112596	3.062409	3.111698
[6,6]	3.259727	3.254003	3.256051	3.005032	3.010781	3.260882	3.210048	3.260399
[7,7]	3.38655	3.381534	3.383306	3.128925	3.171078	3.387542	3.336232	3.387369
[8,8]	3.497215	3.492748	3.494307	3.237341	3.307302	3.498082	3.446407	3.498149
[9.9]	3.595375	3.591345	3.592735	3.33372	3.425608	3.596141	3.544179	3.5964
[10,10]	3.683569	3.679896	3.681147	3.420469	3.530087	3.684252	3.632058	3.684668

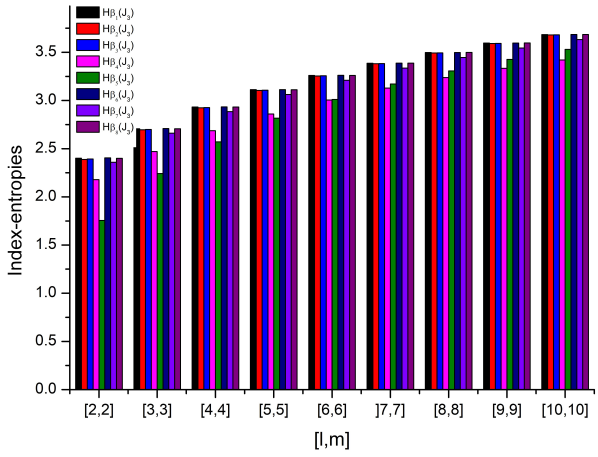


图9： J_3的指标熵图形比较

8 结论与未来工作

本研究推导出了碳纳米管 Y 形结图的 NM 多项式的一般表达式，并从这些多项式的表达式中获得了各种基于邻域度和的拓扑指数。此外，我们定义并计算了 Y 形结图的八种以这些拓扑指数表示的图熵。我们还绘制了一些 Y 形结图的拓扑指数和指标熵数值，以便进行比较。拓扑指数基于顶点的度，能够有效预测化学分子的各种物理化学性质和生物活性。因此，本研究的发现可作为预测各种物理化学性质及理解碳纳米管 Y 形结结构问题的有效选择。

我们提出了若干未来研究的可能方向，包括乘法拓扑指标、图指标熵、指标熵与拓扑指数之间的回归模型、度量维数和边度量维数等，以预测碳纳米管Y形结的热化学数据、物理化学性质和结构信息。

数据可用性
本研究的发现未使用任何数据作为支持。

利益冲突
作者声明不存在利益冲突。

资助声明
作者未为本研究获得任何专项资助。

作者贡献声明
最终稿由**Sohan Lal** 和**Vijay Kumar Bhat**撰写。图表由**Sohan Lal** 和**Sahil Sharma**制作。所有作者均审阅并编辑了最终稿。

参考文献

[1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, C_{60}: 巴克明斯特富勒烯，《自然》，318(6042)（1985年），162–163。https://doi.org/10.1038/318162a0.

[2]S. Iijima，石墨碳的螺旋微管，《自然》，354(6348)（1991年），56–58。https://doi.org/10.1038/354056a0.

[3] D. H. Kim, J. Huang, H. K. Shin, S. Roy, W. Choi，Y形及交叉结处单壁碳纳米管（SWNTs）的输运现象与导电机制，《纳米快报》，6(12)（2006），2821-2825。https://doi.org/10.1021/nl061977q.

[4]H. Mei, Y. Cheng，基于碳纳米管的电学性质研究进展；《互连与铁电体》，564(1)（2020），1–18。https://doi.org/10.1080/00150193.2020.1761697。[5] V. Meunier, M. B. Nardelli, J. Bernholc, T. Zacharia, J. C. Charlier，碳纳米管Y形结的本征电子输运特性，《应用物理快报》，81(27)（2002），5234–5236。https://doi.org/10.1063/1.1533842。[6] T. Palm, L. Thylen，利用电子波导Y形分支开关设计逻辑功能，《应用物理学杂志》，79(10)（1996），8076–8081。https://doi.org/10.1063/1.362362。[7] X. Yang, Z. Han, Y. Li, D. Chen, P. Zhang, A. C. To，单壁碳纳米管非正交X形结的热焊接，《物理学E辑：低维系统与纳米结构》，46（2012），30–32。https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.08.015。[8]A. Aiyiti, Z. Zhang, B. Chen, S. Hu, J. Chen, X. Xu, B. Li，Y形结碳纳米管束中的热整流，《碳》，140（2018），673–679。https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.09.002。[9]H. He, L. A. Pham-Huy, P. Dramou, D. Xiao, P. Zuo, C. Pham-Huy，碳纳米管：在药学与医学中的应用，《生物医学研究国际》，（2013）。https://doi.org/10.1155/2013/578290。[10] P. M. Ajayan, O. Z. Zhou，碳纳米管的应用，《应用物理专题》，80（2001）391-425。https://doi.org/10.1007/3-540-39947-X 14。[11] J. M. Schnorr, T. M. Swager，碳纳米管的新兴应用，《化学材料》，23(3)（2011），646-657。https://doi.org/10.1021/cm102406h。[12] I. L´aszl´o，单壁碳纳米管结的拓扑描述与构建，《克罗地亚化学学报》，78(2)（2005），217–221。[13] K. Nagy, C. L. Nagy，扶手椅型纳米管Y形结、金刚石及相关纳米结构中的超石墨烯，《碳材料：化学与物理》，6（2013），207–227。https://doi.org/10.1007/978- 94-007-6371-5 11。[14] G. Treboux, P. Lapstun, K. Silverbrook，纳米管Y形结中的电导，《化学物理快报》，306（1999），402–406。https://doi.org/10.1016/S0009-2614(99)00445-5。[15] E. Tylianakis, G. K. Dimitrakakis, S. Melchor, J. A. Dobado, G. E. Froudakis，多孔纳米管网络：一种储氢能力增强的新型三维纳米结构材料，《化学通讯》，47(8)（2011），2303–2305。https://doi.org/10.1039/C0CC03002C。[16] L. A. Chernozatonskii，碳纳米管连接器与平面丛林结构，《物理学快报A辑》，172(3)（1992年），173–176。https://doi.org/10.1016/0375-9601(92)90978-U。

[17] G. E. Scuseria，负曲率与超富勒烯，《化学物理快报》，195(5-6) (1992年)，534–536. https://doi.org/10.1016/0009-2614(92)85558-R.

[18] D. Zhou，S. Seraphin，碳纳米管生长中的复杂分支现象，《化学物理快报》，238(4-6) (1995年)，286–289. https://doi.org/10.1016/0009-2614(95)00406-T.[19] P. R. Bandaru，碳纳米管结构的电学性质与应用，《纳米科学与纳米技术杂志》，7(4-5) (2007)，1239-1267. https://doi.org/10.1166/jnn.2007.307.[20]L. Chernozatonskii，碳纳米管三端结：合成、结构、性质与应用，《纳米颗粒研究》，5(5) (2003)，473-484. https://doi.org/10.1023/B:NANO.0000006154.15176.0f.[21]Y. Yin，Y. Chen，J. Yin，K. Huang，完美Y形分支碳纳米管的几何守恒定律，《纳米技术》，17(19) (2006)，4941–4945. https://doi.org/10.1088/0957- 4484/17/19/027.[22]I. Gutman，O. E. Polansky，有机化学中的数学概念，施普林格，1986. https://doi.org/10.1007/978-3-642-70982-1.[23]E. Estrada，E. Molina，用于定量构效关系/定量结构-活性关系和分子设计的新型局部（基于片段）拓扑分子描述符，《分子图形与模型杂志》，20(1) (2001)，54-64. https://doi.org/10.1016/S1093-3263(01)00100-0.

[24] S. A. K. Kirmani、P. Ali、F. Azam，关于正在研究用于治疗2019冠状病毒病患者的某些抗病毒药物的拓扑指数及定量构效关系/定量结构-活性关系分析，《国际量子化学杂志》，121(9)（2021）。https://doi.org/10.1002/qua.26594。

[25]S. Mondal、A. Dey、N. De、A. Pal，基于邻域度的新型拓扑描述符的定量构效关系分析，《复杂与智能系统》，7(2)（2021），977-996。https://doi.org/10.1007/s40747-020-00262-0。

[26] H. Wiener，石蜡沸点的结构测定，《美国化学会志》，69（1947），17–20。

[27] R. Jagadeesh、M. R. Kanna、R. S. Indumathi，关于石墨烯拓扑指数的一些结果，《纳米材料与纳米技术》，6（2016）。https://doi.org/10.1177/1847980416679626。

[28] M. Ghorbani、M. A. Hosseinzadeh，第三版扎格雷布指数，《Discrete Math. Algorithms Appl.》，5(04)（2013）。https://doi.org/10.1142/S1793830913500390。[29] S. Mondal、N. De、A. Pal，关于一些新的邻域度指数，Acta Chemica Iasi，27(1)（2019），31–46。[30]S. Mondal、M. K. Siddiqui、N. De、A. Pal，晶体结构的邻域 M 多项式，《Biointerface Res. Appl. Chem.》，11(2)（2021），9372-9381。https://doi.org/10.33263/BRIAC112.93729381。[31] M. Chamua、J. Buragohain、A. Bharali、M. E. Nazari，多环芳烃的基于邻域度数和的拓扑指数的预测能力，《J. Mol. Struct.》，1270（2022）。https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133904。[32] S. Mondal、N. De、A. Pal，关于一些氧化物和硅酸盐网络的新型邻域度指数，《J. Multidiscip. Res.》，2(3)（2019），384–409。https://doi.org/10.3390/j2030026。[33] S. Mondal、N. De、A. Pal，关于一些一般邻域度指数，《Int. J. Appl. Math.》，32(6)（2019），1037–1049。https://doi.org/10.12732/ijam.v32i6.10。[34]S. Mondal、N. De、A. Pal，分形和凯莱树树枝状分子的基于邻域度数和的分子描述符，《Eur. Phys. J. Plus》，136(3)（2021），1-37。https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-021-01292-4。[35]S. Mondal、N. De、A. Pal，应用于2019冠状病毒病患者治疗的若干化学结构的拓扑指数，《Polycycl. Aromat. Compd.》，42(4)（2022），1220-1234。https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1770306。

[36] M. C. Shanmukha, A. Usha, K. C. Shilpa, N. S. Basavarajappa，采用 M 多项式和邻域 M 多项式方法研究多孔石墨烯的拓扑指数，《Eur. Phys. J. Plus》，136(10)(2021)，1-16。https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-021-02074-8。

[37] S. Mondal, N. De, M. K. Siddiqui, A. Pal，利用邻域 M 多项式研究若干凸多胞体旁线图的拓扑性质，《Biointerface Res. Appl. Chem.》，11(3) (2020)，9915-9927。https://doi.org/10.33263/BRIAC113.99159927。[38] S. Mondal, M. Imran, N. De, A. Pal，钛化合物的邻域 M 多项式，《Arab. J. Chem.》，14(8) (2021)，103244。https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103244。[39] E. Trucco，关于图的信息含量札记，《Bull. Math. Biophys.》，18(2) (1956)，129–135。https://doi.org/10.1007/BF02477836。[40] M. Dehmer，复杂网络中的信息处理：图熵与信息泛函，《Appl. Math. Comput.》，201(1-2) (2008)，82–94。https://doi.org/10.1016/j.amc.2007.12.010。[41] N. Rashevsky，生命、信息论与拓扑学，《Bull. Math. Biophys.》，17(3) (1955)，229-235。https://doi.org/10.1007/BF02477860。[42]W. H. Zurek，复杂性、熵与信息物理学，CRC出版社，2018。https://doi.org/10.1201/9780429502880。[43]M. Arockiaraj, J. Jency, J. Abraham, S. Ruth Julie Kavitha, K. Balasubramanian，二维冠烯分形结构：拓扑熵度量、能量学、核磁共振和电子自旋共振光谱模式及等熵结构的存在，《Mol. Phys.》，120(11) (2022)，1-15。https://doi.org/10.1080/00268976.2022.2079568。[44] J. Abraham, M. Arockiaraj, J. Jency, S. Kavitha, K. Balasubramanian，三类等网状金属有机框架的图熵、回路与游走计数及拓扑性质，《数学杂志 Chem.》，60(4) (2022)，695-732。https://doi.org/10.1007/s10910-021-01321-8。[45] D. Bonchev，用于表征化学结构的信息论指数，Research Studies出版社，奇切斯特，1983。[46] Y. J. Tan, J. Wu，网络结构熵及其在无标度网络中的应用，《Syst. Eng. Theory Pract.》，24(6) (2006)，1–3。[47] A. Mowshowitz，熵与图的复杂性：I. 图相对复杂度的一个指数，《Bull. Math. Biophys.》，30 (1968)，175–204。https://doi.org/10.1007/BF02476948。[48]A. Mowshowitz，熵与图的复杂性：II. 有向图和无限图的信息含量，《Bull. Math. Biophys.》，30 (1968)，225–240。https://doi.org/10.1007/BF02476692。[49] A. Mowshowitz，熵与图的复杂性：III. 具有指定信息量的图，《Bull. Math. Biophys.》，30 (1968)，387–414。https://doi.org/10.1007/BF02476603。[50] A. Mowshowitz，熵与图的复杂性：IV. 熵度量与图结构，《Bull. Math. Biophys.》，30 (1968)，533–546。https://doi.org/10.1007/BF02476673。[51] A. Shabbir, M. F. Nadeem，碳纳米管 Y 形结的基于拓扑指数的熵的计算分析，《J. Stat. Phys.》，188(31) (2022)，1-26。https://doi.org/10.1007/s10955-022-02955-x。[52] M. F. Nadeem, M. Azeem, I. Farman，封端和未封端碳纳米管拓扑指数的比较研究，《Polycycl. Aromat. Compd.》，42(7) (2022)，4666-4683。https://doi.org/10.1080/10406638.2021.1903952。[53]M. Baˇca, J. Horv´athov´a, M. Mokriˇsov´a, A. Semaniˇcov´a-Feˇnovˇc´ıkov´a, A. Suh´anyiov´a，碳纳米管网络的拓扑指数，《Can. J. Chem.》，93(10) (2015)，1157-1160。https://doi.org/10.1139/cjc-2015-0175。[54]M. Azeem, M. Jamil, A. Javed, A. Ahmad，利用 M 多项式验证 Y 形结纳米结构的若干拓扑指数，《数学杂志》，(2022)。https://doi.org/10.1155/2022/8238651。

[55] A. N. A. H. Ahmad，基于顶点-边的拓扑描述符对 Y 形结纳米管的比较研究，《数学杂志》（2022）。https://doi.org/10.1155/2022/2383074.

[56]A. Shabbir，对对称碳纳米管 Y 形结的拓扑不变量进行计算与比较分析，《Arab. J. Chem.》，15(1)（2022）。https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103509.[57] M. P. Rahul，J. Clement，J. S. Junias，M. Arockiaraj，K. Balasubramanian，基于香农方法的石墨烯、石墨炔和石墨二炔的基于度的熵，《J. Mol. Struct.》，1260（2022）。https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.132797.[58] S. Cao，M. Dehmer，Y. Shi，基于度的图熵的极值性，《Inform. Sci.》，278（2014），22–33。https://doi.org/10.1016/j.ins.2014.03.133.[59] Z. Chen，M. Dehmer，Y. Shi，关于基于距离的图熵的一则注记，《熵》，16(10)（2014），5416–5427。https://doi.org/10.3390/e16105416.[60] M. Dehmer，K. Varmuza，S. Borgert，F. Emmert-Streib，关于基于熵的分子描述符：真实与合成化学结构的统计分析，《J. Chem. Inf. Model.》49(7)（2009），1655–1663。https://doi.org/10.1021/ci900060x.