

Kimyasal Grafların Euler Sombor İndeksi

Gül Özkan Kızılırmak^{*1} , Ivan Gutman² ¹Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Matematik Bölümü, 06500, Ankara, Türkiye²University of Kragujevac, Faculty of Science, 34000, Kragujevac, Serbia

Öne Çıkanlar

- Bu çalışmada Euler Sombor indeksinin eşit sayıda noktaya sahip bağlantılı kimyasal graflar ve kimyasal ağaçlar üzerindeki ekstrem değerleri elde edilmiştir.
- Bazı kimyasal graflar için bu indekslerin hesaplamaları yapılmıştır.
- İspatlanan teoremlerle birlikte yapılan hesaplamalar, kimyasal graf teorisinde yapısal analizlere yeni katkılar sunmuştur.

Makale Bilgileri

Geliş: 23/12/2024
Kabul: 05/05/2025

Anahtar Kelimeler

Euler Sombor indeksi,
Kimyasal Graf,
Nokta derecesine bağlı
topolojik indeks

Öz

G basit bir graf olsun. G 'nin Euler Sombor indeksi

$$EU(G) = \sum_{uv} \sqrt{d_u^2 + d_v^2 + (d_u d_v)}$$

şeklinde tanımlıdır. Burada, d_u , u noktasının derecesini belirtir ve toplam, G 'nin kenarlar kümesi üzerinde ilerler. Bu çalışma, Euler Sombor İndeksi'nin eşit sayıda noktaya sahip bağlantılı kimyasal graflar ve kimyasal ağaçlar üzerindeki ekstrem değerlerini incelemektedir. Ayrıca bazı kimyasal graflar için hesaplamalar yapılmıştır. Euler Sombor İndeksi, kimyasal bileşiklerin topolojik yapısını analiz etmek için kullanılan bir derece tabanlı graf indeksidir. Çalışmada, kimyasal graflar için bu indeksin maksimum ve minimum değerlerini belirlemek amacıyla çeşitli teoremler ispatlanmıştır. Sonuçlar, özellikle kimyasal graf teorisinde yapı özelliklerinin analizi açısından önemli çıkarımlar sunmaktadır.

Euler Sombor Index of Chemical Graphs

Highlights

- In this study, the extremal values of the Euler Sombor index on connected chemical graphs and chemical trees with an equal number of vertices were obtained.
- The index was calculated for some chemical graphs.
- The calculations together with the proven theorems have provided new contributions to structural analyses in chemical graph theory.

Article Info

Received: 23/12/2024
Accepted: 05/05/2025

Keywords

Euler Sombor index,
Chemical Graph,
Vertex degree based
topological index

Abstract

Let G be a simple graph. The Euler Sombor index of G is defined as

$$EU(G) = \sum_{uv} \sqrt{d_u^2 + d_v^2 + (d_u d_v)}$$

,where d_u denotes the degree of the vertex u and the sum runs over the set of edges of G . This study investigates the extremal values of the Euler-Sombor index on connected chemical graphs and chemical trees with the same number of vertices. Additionally, computations are performed for certain chemical graphs. The Euler-Sombor index is a degree-based graph invariant used to analyze the topological structure of chemical compounds. In this study, several theorems are proven to determine the maximum and minimum values of this index for chemical graphs. The results provide significant insights, particularly in analyzing structural properties within chemical graph theory.

1. GİRİŞ

G , nokta kümesi V ve kenar kümesi E olan basit bir graf olsun. u noktasından v noktasına bir kenar varsa, uv (veya vu) yazarak gösterilir. Derecesi i olan nokta sayısı n_i ile ve i derecesine sahip bir noktayı j derecesine sahip bir noktaya bağlayan kenar sayısı $m_{i,j}$ ile gösterilir. Bu çalışmada, G 'nin izole noktasının olmadığını varsayacağız.

Son yıllarda, kimyasal bileşiklerin topolojik özelliklerini analiz etmek amacıyla çeşitli derece tabanlı graf indeksleri geliştirilmiştir. Geometrik motivasyonlu ilk derece tabanlı topolojik değişmezlerden biri Sombor indeksi olup

$$SO(G) = \sum_{uv} \sqrt{d_u^2 + d_v^2}$$

şeklinde tanımlanır [1].

Das ve arkadaşları [2], Sombor indeksinin çeşitli graf parametreleriyle ilişkisini inceleyerek, bu indeks için yeni alt ve üst sınırlar elde etmişlerdir. Cruz ve arkadaşları [3], kimyasal graflar üzerinde Sombor indeksinin özelliklerini araştırmış ve bu indeksin kimyasal bileşiklerin yapısal analizinde kullanılabileceğini göstermişlerdir. Liu ve arkadaşları [4], benzenoid hidrokarbonların kaynama noktalarıyla Sombor indeksleri arasındaki ilişkileri inceleyerek, bu indeksin kimyasal özelliklerin tahmininde kullanılabileceğini ortaya koymuşlardır. Redžepović [5], Sombor indeksinin kimyasal uygulanabilirliğini değerlendirerek, bu indeksin çeşitli kimyasal graflardaki yapısal özellikleri yansıttığını belirtmiştir. Méndez-Bermúdez ve arkadaşları [6], ortalama Sombor indeksini tanıtarak, bu yeni indeksin oktan izomerlerinin fizikokimyasal özellikleriyle iyi bir korelasyon gösterdiğini belirtmişlerdir. Kulli [7] tarafından Delta Banhatti-Sombor indeksi tanımlanmış ve bu indeksin çeşitli graf türleri üzerindeki hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Ayrıca Kulli [8] daha sonra Modifiye Domination Sombor indeksi ve buna karşılık gelen üstel fonksiyonu ve üstel fonksiyonu tanımlanmış, bazı özel graflar için bu indekslerin hesaplamaları yapılmıştır. Du ve arkadaşları [9,10], iki ağaçlı graflarda Sombor indeksi ve tamamlayıcı indeksini inceleyerek, bu indekslerin ağaç ve kimyasal graflardaki sonuçlarını elde etmişlerdir. Chen ve arkadaşları [11], benzenoid sistemler üzerinde Sombor ve Eliptik Sombor indekslerini analiz ederek, bu indekslerin benzenoid hidrokarbonların yapısal özelliklerini yansıttığını ortaya koymuşlardır. Gutman ve arkadaşları [12], Eliptik Sombor indeksini tanıtarak, bu yeni indeksin moleküler yapıların analizinde kullanılabileceğini belirtmişlerdir. Kızıllırmak [13], Eliptik Sombor tamamlayıcı indeksinin graf işlemleri üzerindeki sınırlarını inceleyerek, bu indeksin graf teorisindeki uygulamalarını genişletmiştir.

Daha yakın tarihlerde, farklı bir geometrik yaklaşımla Euler-Sombor indeksi Tang ve arkadaşları tarafından tanımlanmıştır [14]:

$$EU(G) = \sum_{uv} \sqrt{d_u^2 + d_v^2 + (d_u d_v)} \quad (1)$$

Sombor indeksinin bir genellemesi olan Euler-Sombor indeksi, kimyasal grafların yapısal ayrıntılarını daha güçlü bir şekilde ayırt edebilme kapasitesi nedeniyle ilgi çekmiştir. Hu ve arkadaşları [15] maksimum dış düzlemsel (outerplanar) graflarda Euler Sombor indeksinin ekstremal değerlerini araştırırken, Gutman [16] Sombor ve Euler Sombor indeksleri arasındaki matematiksel ilişkiyi inceleyerek aralarındaki benzerlikleri ve farkları ortaya koymuştur.

Topolojik indeksler, özellikle derece tabanlı olanlar, teorik kimya alanında önemli bir rol oynamaktadır. Bu indeksler, moleküler yapıların sayısal olarak tanımlanmasına olanak tanır ve kaynama noktası, stabilite, reaktivite gibi fizikokimyasal özelliklerin tahmininde sıklıkla kullanılmaktadır. Hayat ve arkadaşları [17] monokarboksilik asitlerin fizikokimyasal özelliklerinin tahmininde Sombor indeksinin kullanılabileceğini göstermiş ve Sombor indeksinin moleküler ağırlık, kaynama noktası ve molar hacim gibi özelliklerle yüksek korelasyon elde etmişlerdir.

Shashidhara ve arkadaşları [18] Domination Sombor indeksini tanımlamış ve bu indeksi bütün türevlerinin fizikokimyasal özelliklerinin tahmininde kullanmıştır. Bu makalenin temel amacı, eşit sayıda noktaya sahip kimyasal graflarda, özellikle kimyasal ağaçlar ve bağlantılı kimyasal graflar üzerinde Euler-Sombor indeksinin ekstrem değerlerini incelemektir. Önceki çalışmalar çoğunlukla genel graflar üzerine yoğunlaşırken, bu çalışmada belirli yapısal kısıtlamalar altında Euler-Sombor indeksini maksimize veya minimize eden graf yapıları karakterize edilmiştir. Bu doğrultuda, Euler-Sombor indeksi için teorik sınırlar elde edilmiş, bazı karakterizasyon teoremleri ispatlanmış ve çeşitli bilinen kimyasal graflar üzerinde doğrudan hesaplamalar yapılmıştır. Bu çalışma, Euler-Sombor indeksinin teorik temellerini derinleştirdiği gibi, kimyasal graf teorisine katkı sağlayarak topolojik kriterler üzerinden moleküler yapıları analiz etmek için yeni araçlar sunmaktadır.

2. KİMYASAL GRAFLARDA EULER SOMBOR İNDEKSİ: TEORİK TEMELLER, KİMYASAL AĞAÇLAR VE UYGULAMALI İNCELEMELER

2.1. Kimyasal Grafların Euler Sombor İndeksi

G 'nin izole noktası olmayan tüm $u \in V$ noktaları için $d_u \leq 4$ ü sağlayan n noktalı bir kimyasal graf olduğunu varsayalım. Bu durumda

$$n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = n, \quad (2)$$

ve

$$2m_{1,1} + m_{1,2} + m_{1,3} + m_{1,4} = n_1, \quad (3)$$

$$m_{1,2} + 2m_{2,2} + m_{2,3} + m_{2,4} = 2n_2,$$

$$m_{1,3} + m_{2,3} + 2m_{3,3} + m_{3,4} = 3n_3,$$

$$m_{1,4} + m_{2,4} + m_{3,4} + 2m_{4,4} = 4n_4$$

bağıntıları geçerlidir.

(2) ve (3) bağıntılarından

$$\sum_{(x,y) \in P} \frac{x+y}{xy} m_{x,y} = n, \quad (4)$$

elde edilir. Burada

$$P = \{(x, y) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} \mid 1 \leq x \leq y \leq 4\} \quad (5)$$

dir.

Bu durumda (1) ifadesi

$$EU(G) = \sum_{(x,y) \in P} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \quad (6)$$

olarak yazılabilir.

Teorem 2.1.1. G n noktalı bir kimyasal graf olsun. O zaman

$$EU(G) \leq 8\sqrt{3}n$$

dir.

Eşitlik yalnızca G 'nin 4-regüler bir graf olması koşuluyla sağlanır.

İspat. $C = \{(x, y) \in P \mid (x, y) \neq (4, 4)\}$ olsun. Öncelikle (6)'daki toplamı (4,4) ve diğerleri olmak üzere

$$EU(G) = 4\sqrt{3}m_{4,4} + \sum_{(x,y) \in C} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)}m_{x,y}$$

şeklinde ayırılım. Her $(x, y) \in C$ için (4)'den $m_{4,4} = 2n - 2 \sum_{(x,y) \in C} \frac{x+y}{xy} m_{x,y}$ olup bu ifade yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} EU(G) &= 4\sqrt{3} \left(2n - 2 \sum_{(x,y) \in C} \frac{x+y}{xy} m_{x,y} \right) + \sum_{(x,y) \in C} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \\ &= 8\sqrt{3}n + \sum_{(x,y) \in C} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - 8\sqrt{3} \frac{x+y}{xy} \right) m_{x,y} \end{aligned}$$

bulunur. Burada her $(x, y) \in C$ için

$$\left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - 8\sqrt{3} \frac{x+y}{xy} \right) < 0, \quad (7)$$

olduğu kolayca görülebilir. Sonuç olarak

$$EU(G) \leq 8\sqrt{3}n \quad (8)$$

elde edilir.

Eşitlik durumunda, yani $EU(G) = 8\sqrt{3}n$ ise (8)'den,

$$\sum_{(x,y) \in C} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - 8\sqrt{3} \frac{x+y}{xy} \right) m_{x,y} = 0$$

bulunur. (7)'den her $(x, y) \in C$ için, $m_{x,y} = 0$ 'dır. Yani, yalnızca (4,4) derecesine sahip kenarlar mevcut olmalıdır. Bu da G 'nin 4-regüler bir graf olduğunu gösterir.

Tersine, eğer G , 4-regüler bir graf ise, her noktanın derecesi 4 olup toplam kenar sayısı $\frac{4n}{2}$ dir. Buradan

$$EU(G) = 4\sqrt{3}m_{4,4} = 4\sqrt{3}m = 4\sqrt{3} \frac{4n}{2} = 8\sqrt{3}n$$

elde edilir.

Teorem 2.1.2. G n noktalı bir kimyasal graf olsun. O zaman,

1. n çift olduğunda, $EU(G) \geq \frac{\sqrt{3}n}{2}$, dir. Eşitlik yalnızca $G \cong \frac{n}{2}P_2$ koşuluyla sağlanır.
2. n tek olduğunda, $EU(G) \geq \frac{n-3}{2}\sqrt{3} + 2\sqrt{7}$, dir. Eşitlik yalnızca $G \cong \frac{n-3}{2}P_2 \cup P_3$ koşuluyla sağlanır.

İspat. 1. Kabul edelim ki n çift ve $A = \{(x, y) \in P \mid (x, y) \neq (1, 1)\}$ olsun. Ayrıca

$$\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{x+y}{xy} > 0 \quad (9)$$

olduğu açıkça görülür. (4)'den $m_{1,1} = \frac{1}{2} \left(n - \sum_{(x,y) \in A} \frac{x+y}{xy} m_{x,y} \right)$ olup (6)'daki toplam (1,1) ve diğerleri olmak üzere yazılırsa

$$\begin{aligned} EU(G) &= \sqrt{3}m_{1,1} + \sum_{(x,y) \in A} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} \left(n - \sum_{(x,y) \in A} \frac{x+y}{xy} m_{x,y} \right) + \sum_{(x,y) \in A} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \\ &= \frac{\sqrt{3}n}{2} + \sum_{(x,y) \in A} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{x+y}{xy} \right) m_{x,y} \end{aligned}$$

bulunur. Böylece (9)'dan

$$EU(G) \geq \frac{\sqrt{3}}{2} n \quad (10)$$

elde edilir. Eğer $EU(G) = \frac{\sqrt{3}n}{2}$ ise, (10) eşitsizliğinden,

$$\sum_{(x,y) \in A} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{x+y}{xy} \right) m_{x,y} = 0$$

olup (9)'daki özellikten her $(x,y) \in A$ için $m_{x,y} = 0$ 'dır. Diğer bir deyişle, G, P_2 kopyalarının ayırık bir birleşimidir yani, $G \cong \frac{n}{2} P_2$ 'dir.

Tersine, $G \cong \frac{n}{2} P_2$ ise o zaman $\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} = \frac{n}{2} EU(P_2) = \frac{\sqrt{3}n}{2}$ dir.

2. Kabul edelim ki n tek olsun. G 'nin izole noktası olmadığından, $m_{1,1} \leq \frac{n-3}{2}$ dir.

$B = \{(x,y) \in A \mid (x,y) \neq (1,2)\}$
olsun. O zaman

$$\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - \frac{2\sqrt{7}}{3} \frac{x+y}{xy} > 0 \quad (11)$$

ve (4)'den

$$m_{1,2} = \frac{2}{3}n - \frac{4}{3}m_{1,1} - \frac{2}{3} \sum_{(x,y) \in B} \frac{x+y}{xy} m_{x,y}. \quad (12)$$

olduğu kolayca görülebilir.

(11) ve (12)'den

$$\begin{aligned} EU(G) &= \sqrt{3}m_{1,1} + \sqrt{7}m_{1,2} + \sum_{(x,y) \in B} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \\ &= \left(\sqrt{3} - \frac{4\sqrt{7}}{3} \right) m_{1,1} + \frac{2\sqrt{7}}{3}n + \sum_{(x,y) \in B} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} - \frac{2\sqrt{7}}{3} \frac{x+y}{xy} \right) m_{x,y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\geq \left(\sqrt{3} - \frac{4\sqrt{7}}{3}\right)m_{1,1} + \frac{2\sqrt{7}}{3}n \\
&\geq \left(\sqrt{3} - \frac{4\sqrt{7}}{3}\right)\frac{n-3}{2} + \frac{2\sqrt{7}}{3}n \\
&= \frac{n-3}{2}\sqrt{3} + 2\sqrt{7}
\end{aligned} \tag{13}$$

elde edilir. Eğer $EU(G) = \frac{n-3}{2}\sqrt{3} + 2\sqrt{7}$ ise (13) eşitsizliğinden, $m_{1,1} = \frac{n-3}{2}$ ve her $(x, y) \in B$ için $m_{x,y} = 0$ dir. Bu durumda $G \cong \frac{n-3}{2}P_2 \cup P_3$ olduğu sonucuna ulaşılır.

Tersine, eğer $G \cong \frac{n-3}{2}P_2 \cup P_3$ ise o zaman

$$EU(G) = \frac{n-3}{2}EU(P_2) + EU(P_3) = \frac{n-3}{2}\sqrt{3} + 2\sqrt{7}$$

dir.

Sonuç 2.1.3. G n noktalı bir kimyasal graf olsun. O zaman,

$$2\sqrt{3}(n-3) + 2\sqrt{7} \leq EU(G) \leq 8\sqrt{3}n$$

dir. Sol tarafta eşitlik yalnızca $G \cong P_n$ koşuluyla, sağ tarafta yalnızca G 'nin bağlantılı, 4-regüler graf olması koşuluyla sağlanır.

İspat. Bu sonuç, Tang, Li ve Deng [14] tarafından elde edilen Sonuç 3.10 ile birlikte, Teorem 2.1'den doğrudan türetilmektedir.

2. 2. Kimyasal Ağaçların Euler Sombor İndeksi

$\mathcal{C}_n$, n noktalı tüm kimyasal ağaçların kümesini gösterebilir. Tang ve arkadaşları tarafından [14] Sonuç 3.10'da, P_n 'nin tüm n noktalı ağaçlar arasında minimum EU değerine sahip olduğu gösterilmiştir. Açıkça, P_n 'nin tüm n noktalı kimyasal ağaçlar arasında da minimum EU değerine sahip olduğu görülmektedir.

Yardımcı Teorem 2.2.1. $n \geq 3$ olmak üzere $T \in \mathcal{C}_n$ olsun. O zaman,

$$f(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} + \frac{16\sqrt{3} - 4\sqrt{21}}{3} \frac{x+y}{xy} - \frac{20\sqrt{3} - 2\sqrt{21}}{3}$$

olmak üzere

$$EU(T) = \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + \sum_{(x,y) \in P} f(x, y)m_{x,y} \tag{14}$$

dir.

İspat. Herhangi bir $T \in \mathcal{C}_n$ ($n \geq 3$) için kimyasal ağaçlar n nokta ve $n-1$ kenardan oluştuğundan,

$$n-1 = \sum_{(x,y) \in P} m_{x,y} \tag{15}$$

dir.

(4) ve (15) bağıntıları $C' = \{(x, y) \in P \mid (x, y) \neq (1,1), (x, y) \neq (1,4), (x, y) \neq (4,4)\}$ olmak üzere

$$5m_{1,4} + 2m_{4,4} = 4n - \sum_{(x,y) \in C'} 4 \frac{x+y}{xy} m_{x,y}$$

ve

$$m_{1,4} + m_{4,4} = n - 1 - \sum_{(x,y) \in C'} m_{x,y}$$

şeklinde yeniden yazılabilir:

Önceki bağıntılardan $m_{1,4}$ ve $m_{4,4}$ için aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$3m_{1,4} = 2n + 2 - \sum_{(x,y) \in C'} \left(4 \frac{x+y}{xy} - 2 \right) m_{x,y}$$

$$3m_{4,4} = n - 5 + \sum_{(x,y) \in C'} \left(4 \frac{x+y}{xy} - 5 \right) m_{x,y}.$$

Buradan T 'nin Euler Sombor indeksi

$$\begin{aligned} EU(T) &= \sqrt{21}m_{1,4} + 4\sqrt{3}m_{4,4} + \sum_{(x,y) \in C'} \sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} m_{x,y} \\ &= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3} n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} \\ &\quad + \sum_{(x,y) \in C'} \left[\sqrt{x^2 + y^2 + (xy)} + \frac{16\sqrt{3} - 4\sqrt{21}}{3} \frac{x+y}{xy} - \frac{20\sqrt{3} - 2\sqrt{21}}{3} \right] m_{x,y} \\ &= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3} n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + \sum_{(x,y) \in C'} f(x, y) m_{x,y} \end{aligned}$$

olarak bulunur.

$f(1,4) = f(4,4) = 0$ ve $m_{1,1} = 0$ olduğundan istenilen sonuç elde edilir.

Aşağıdaki eşitsizliklerin sağlandığı kolayca görülebilir:

$$f(2,3) < f(2,2) < f(1,2) < f(2,4) < f(3,4) < 0 = f(1,4) = f(4,4), \quad (16)$$

$$f(3,3) < f(2,3) < f(1,3) < f(3,4) < 0 = f(1,4) = f(4,4), \quad (17)$$

$$f(2,2) < 2f(2,4), \quad (18)$$

$$f(3,3) < 2f(3,4). \quad (19)$$

Teorem 2.2.2. $n \geq 3$ olmak üzere $T \in \mathcal{C}_n$ olsun. O zaman,

$$EU(T) \leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3} n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} \quad (20)$$

dır. Eşitlik yalnızca $n_2(T) = n_3(T) = 0$ olması koşuluyla sağlanır.

İspat. (14) eşitsizliğinden

$$EU(T) = \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + \sum_{(x,y) \in P} f(x,y)m_{x,y}$$

olup (16) ve (17) eşitsizliklerinden $1 \leq x \leq y \leq 4$ için $f(x,y)$ nin 0 veya negatif bir değer aldığı görülür. Buradan

$$EU(T) \leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3}$$

Elde edilir. Eğer

$$EU(T) = \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3}$$

ise (16), (17) ve (20) eşitsizliklerinden her $(x,y) \in C'$ için $m_{x,y} = 0$ sonucuna ulaşılır. Bu durum yalnızca T 'nin derecesi 2 veya 3 olan bir noktaya sahip olmaması koşuluyla sağlanır.

Tersine, eğer, T derecesi 2 veya 3 olan bir noktaya sahip değilse (14) bağıntısı ile $f(1,4) = f(4,4) = 0$ ve $m_{1,1} = 0$ olduğu göz önüne alınarak

$$\begin{aligned} EU(T) &= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + \sum_{(x,y) \in P} f(x,y)m_{x,y} \\ &= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} \end{aligned}$$

elde edilir.

Pozitif bir n tamsayısı için $\mathcal{C}_n$ 'in aşağıdaki alt kümelerini ele alalım:

$$\mathcal{C}_{00}(n) = \{T \in \mathcal{C}_n | n_2(T) = n_3(T) = 0\},$$

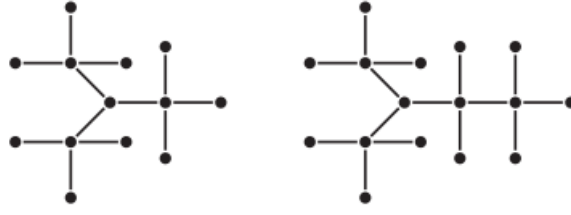
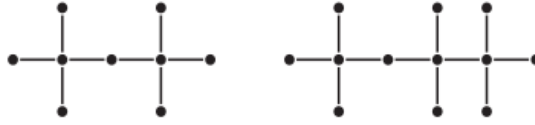
$$\mathcal{C}_{10}(n) = \{T \in \mathcal{C}_n | n_2(T) = 1, n_3(T) = 0\},$$

$$\mathcal{C}_{01}(n) = \{T \in \mathcal{C}_n | n_2(T) = 0, n_3(T) = 1\}.$$

Şekil 1, Cruz ve arkadaşlarının çalışmasında [19] sunulan $\mathcal{C}_{00}$ 'daki ağaçları, Şekil 2, $m_{1,3} = 0$ olan $\mathcal{C}_{01}$ içindeki ağaçları ve Şekil 3, $m_{1,2} = 0$ olan $\mathcal{C}_{10}$ içindeki ağaçları göstermektedir.



Şekil 1. $\mathcal{C}_{00}$ 'daki ağaçlar [19]

Şekil 2. $m_{1,3} = 0$ olan $\mathcal{C}_{01}$ içindeki ağaçlar [19]Şekil 3. $m_{1,2} = 0$ olan $\mathcal{C}_{10}$ içindeki ağaçlar [19]

Teorem 2.2.3. n pozitif bir tamsayı olduğunda $\mathcal{C}_n$ kümesindeki ağaçlar arasında Euler Sombor indeksinin maksimum değerini aşağıdaki gibi belirler:

1. $n \equiv 0 \pmod{3}$ ve $n \geq 9$ ise $m_{1,2}(U) = 0$ olmak üzere $U \in \mathcal{C}_{10}(n)$ ' dir.
2. $n \equiv 1 \pmod{3}$ ve $n \geq 13$ ise $m_{1,3}(V) = 0$ olmak üzere $V \in \mathcal{C}_{01}(n)$ ' dir.
3. $n \equiv 2 \pmod{3}$ ve $n \geq 5$ ise $W \in \mathcal{C}_{00}(n)$ ' dir.

İspat.

1. $n \equiv 0 \pmod{3}$ ise $\mathcal{C}_{00}(n) = \emptyset$ ve $\mathcal{C}_{01}(n) = \emptyset$ dir. (14) eşitsizliğinden

$$EU(T) = \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + \sum_{(x,y) \in P} f(x,y)m_{x,y}$$

olup (16) ve (18)' den

$$\begin{aligned} EU(T) &\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + f(1,2)m_{1,2} + f(2,2)m_{2,2} + f(2,3)m_{2,3} \\ &\quad + f(2,4)m_{2,4} \\ &\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + f(2,4)(m_{1,2} + 2m_{2,2} + m_{2,3} + m_{2,4}) \\ &= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 2n_2(T)f(2,4) \end{aligned}$$

elde edilir.

Eğer $n_2(T) = 0$ ise o zaman

$$EU(T) < \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3}$$

dır. Eşitlik yalnızca $T \in \mathcal{C}_{00}(n)$ ve $\mathcal{C}_{00}(n) = \emptyset$ olması koşuluyla sağlanır.

Eğer $n_2(T) \geq 1$ ise o zaman

$$\begin{aligned}
EU(T) &\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 2n_2(T)f(2,4) \\
&\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 2f(2,4)
\end{aligned}$$

bulunur.

Eşitlik yalnızca $m_{2,4} = 2$ ve $m_{1,2} = m_{1,3} = m_{2,2} = m_{2,3} = m_{3,3} = m_{3,4} = 0$ olması koşuluyla gerçekleşir. Bu, $n_2(T) = 1$ ve $n_3(T) = 0$ olması anlamına gelir. O zaman, eğer $n \equiv 0 \pmod{3}$ ve $n \geq 9$ ise, o zaman EU'nun $\mathcal{C}_n$ üzerindeki maksimum değeri, $m_{1,2}(U) = 0$ olmak üzere $U \in \mathcal{C}_{10}(n)$ olması koşuluyla sağlanır.

2. Eğer $n \equiv 1 \pmod{3}$ ise $\mathcal{C}_{00}(n) = \emptyset$ ve $\mathcal{C}_{10}(n) = \emptyset$ dir. (16), (17) ve (19)' dan

$$\begin{aligned}
EU(T) &\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + f(1,3)m_{1,3} + f(2,3)m_{2,3} + f(3,3)m_{3,3} \\
&\quad + f(3,4)m_{3,4} \\
&\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + f(3,4)(m_{1,3} + 2m_{2,3} + m_{3,3} + m_{3,4}) \\
&= \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 3n_3(T)f(3,4)
\end{aligned}$$

bulunur.

Eğer $n_3(T) = 0$ ise o zaman,

$$EU(T) < \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3}$$

dir. Eşitlik yalnızca $T \in \mathcal{C}_{00}(n)$ ve $\mathcal{C}_{00}(n) = \emptyset$ olması koşuluyla sağlanır.

Eğer $n_3(T) \geq 1$ ise o zaman

$$\begin{aligned}
EU(T) &\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 3n_3(T)f(3,4) \\
&\leq \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3} + 3f(3,4)
\end{aligned}$$

bulunur.

Eşitlik yalnızca $m_{3,4} = 2$ ve $m_{1,2} = m_{1,3} = m_{2,2} = m_{2,3} = m_{2,4} = m_{3,3} = 0$ olması koşuluyla sağlanır. Bu, $n_2(T) = 0$ ve $n_3(T) = 1$ olması anlamına gelir. Eğer $n \equiv 1 \pmod{3}$ ve $n \geq 13$ ise, o zaman EU'nun $\mathcal{C}_n$ üzerindeki maksimum değeri, $m_{1,3}(V) = 0$ olmak üzere $U \in \mathcal{C}_{01}(n)$ olması durumunda elde edilir.

3. Herhangi bir $W \in \mathcal{C}_{00}(n)$ için

$$EU(W) = \frac{2\sqrt{21} + 4\sqrt{3}}{3}n - \frac{4\sqrt{21} + 20\sqrt{3}}{3}$$

olduğundan EU, $\mathcal{C}_{00}(n)$ de sabittir. Teorem 3.2'den istenilen görülür.

2. 3. Euler Sombor İndeksinin Bazı Kimyasal Graflara Uygulamaları

Kimyasal graf kuramında, kimyasal bağlar kenarlarla, moleküldeki atomlar ise noktalarla temsil edilir ve Kimyasal formülü C_nH_{2n+2} olan alkanlar incelenirken, graftaki hidrojen atomlarının çıkarılmasıyla elde edilen graf, hidrojenden arındırılmış moleküler graf ya da diğer adıyla karbon ağacı olarak adlandırılır. Hidrojen atomları graftan çıkarıldığında molekül hakkında herhangi bir bilgi kaybı yaşanmaz; çünkü her karbon atomu dört bağ yaparken, her hidrojen yalnızca bir bağ yapar. Bu nedenle, alkanın geometrik yapısı daha belirgin hale gelir ve graf, analiz açısından daha sade bir hâl alır.

Bu bölümde, sonsuz sayıda sekizgensel döşeme yapısı $OT[m, n]$, titanyum dioksit $TiO_2[m, n]$, dominant oksit $DOX(n)$ ve dominant silikat $DSL(n)$ kimyasal yapıları için Euler Sombor indeksi hesaplanmıştır.

$OT[m, n]$ grafı, m adet yatay ve n adet dikey bağlı zincir yapılarını temsil eden, organik moleküller üzerinde sıkça kullanılan bir yapıdır. Her bir uv kenar çifti, karşılık gelen (d_u, d_v) derece çiftleriyle ilişkilendirilecektir. Bu ilişkilendirme, kenar uç noktalarının derecelerine dayanmaktadır. Bu grafın yapısı dallı bir ağaç şeklindedir. Şekil 4’de, Afzal ve Fatima’nın çalışmasında [20] verilen $OT[m, n]$ yapısının genelleştirilmiş hali gösterilmektedir.

Teorem 2.3.1. $OT[m, n]$ sekizgensel döşeme yapısı için Euler Sombor indeksi

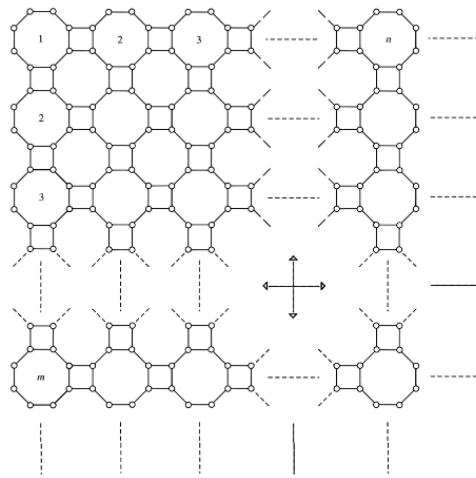
$$EU(OT[m, n]) = 4(\sqrt{19} - 5\sqrt{3})(n + m) + 36\sqrt{3}nm + 20\sqrt{3} - 8\sqrt{19}$$

şeklindedir.

İspat. $OT[m, n]$ ’nin kenar ayrımı incelendiğinde, $2(n + m + 2)$ tane $(2, 2)$ nokta derece çifti, $4(n + m - 2)$ tane $(2, 3)$ nokta derece çifti ve $4(3nm - 2n - 2m + 1)$ tane $(3, 3)$ nokta derece çiftinin bulunduğu görülmektedir [21]. Bu bilgiler ve Euler Sombor indeksi tanımı kullanılarak,

$$\begin{aligned} EU(OT[m, n]) &= 4\sqrt{3(n + m + 2)} + 4\sqrt{19}(n + m - 2) + 12\sqrt{3}(3nm - 2n - 2m + 1) \\ &= 4(\sqrt{19} - 5\sqrt{3})(n + m) + 36\sqrt{3}nm + 20\sqrt{3} - 8\sqrt{19} \end{aligned}$$

şeklinde elde edilir.



Şekil 4. $OT[m, n]$ yapısının genelleştirilmiş oluşumu [20]

$TiO_2[m, n]$ grafi, titanyum dioksit (TiO_2) nanotüplerinin yapısını modelleyen bir graf türüdür. Bu graf, m ve n parametreleriyle belirlenen düzenli bir örgü yapısını temsil eder. Afzal ve Fatima'nın [20] Titania nanotüpleri $TiO_2[m, n]$ 'nin moleküler yapısını verdiği Şekil 5'de m , bir satırdaki sekizgenlerin sayısını; n ise bir sütundaki sekizgenlerin sayısını ifade etmektedir. TiO_2 nanotüpleri, fotokatalizörler, güneş pilleri ve biyomedikal uygulamalar gibi birçok alanda önemli malzemelerdir.

Teorem 2.3.2. $TiO_2[m, n]$ Titania nanotüpleri için Euler Sombor indeksi

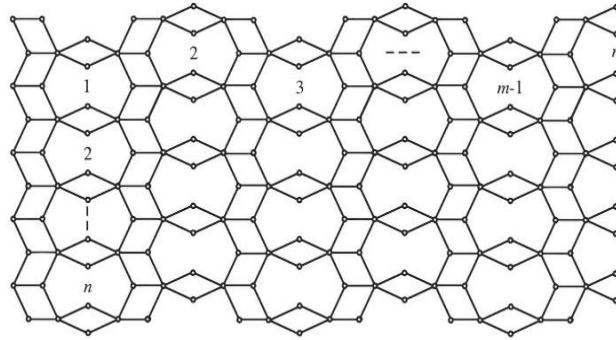
$$EU(TiO_2[m, n]) = 2(6\sqrt{7} + \sqrt{39} + \sqrt{37} - 7)n + 2(4\sqrt{39} + 21)nm$$

şeklindedir.

İspat. Titania nanotüplerinde $6n$ tane $(2, 4)$ nokta derece çifti, $2n + 4mn$ tane $(2, 5)$ nokta derece çifti, $2n$ tane $(3, 4)$ nokta derece çifti ve $6nm - 2m$ tane $(3, 5)$ nokta derece çifti bulunmaktadır [21]. Buradan

$$\begin{aligned} EU(TiO_2[m, n]) &= 12\sqrt{7}n + 2\sqrt{39}n + 8\sqrt{39}nm + 2\sqrt{37}n + 42nm - 14n \\ &= 2(6\sqrt{7} + \sqrt{39} + \sqrt{37} - 7)n + 2(4\sqrt{39} + 21)nm \end{aligned}$$

olarak bulunur.



Şekil 5. Titania nanotüpleri $TiO_2[m, n]$ 'nin moleküler yapısı [20]

$DOX(n)$ grafi, doksorubisin (DOX) dominant oksit molekülünün kimyasal yapısını temsil eden bir graf türüdür. Baig ve arkadaşlarının [22] çalışmasında verilen, $n = 2$ için Dominant Oksit yapısı Şekil 6'da görülmektedir. Bu graf, DOX molekülünün atomları ve bağları arasındaki ilişkileri göstererek, ilacın topolojik özelliklerini analiz etmek için kullanılır. Doksorubisin, kanser tedavisinde kullanılan güçlü bir kemoterapötik ajandır.

Teorem 2.3.3. $DOX(n)$ dominant oksit için Euler Sombor indeksi

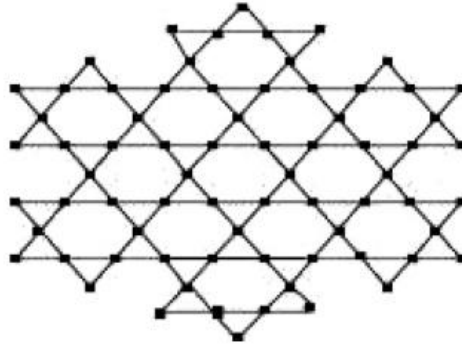
$$EU(DOX(n)) = 216\sqrt{3n^2} + 24(2\sqrt{7} - 13\sqrt{3})n - 24\sqrt{7} + 120\sqrt{3}$$

şeklindedir.

İspat. Dominant oksitin kenar ayrımı incelendiğinde $24n - 12$ tane $(2, 4)$ nokta derece çifti, $54n^2 + 78n + 30$ tane $(4, 4)$ nokta derece çifti bulunmaktadır [21]. Buradan

$$\begin{aligned} EU(DOX(n)) &= (24n - 12)2\sqrt{7} + 4\sqrt{3}(54n^2 - 78n + 30) \\ &= 216\sqrt{3n^2} + 24(2\sqrt{7} - 13\sqrt{3})n - 24\sqrt{7} + 120\sqrt{3} \end{aligned}$$

şeklinde bulunur.



Şekil 6. $n = 2$ için Dominant Oksit yapısı [22]

$DSL(n)$ grafi, yıldız benzeri dallanmış ağaç yapısını modelleyen bir graf türüdür ve Baig ve arkadaşlarının [22] çalışmasında sunulan $n = 2$ için Dominant Silikat yapısı Şekil 7’de görülmektedir.

Teorem 2.3.4. $DSL(n)$ dominant silikat için Euler Sombor indeksi

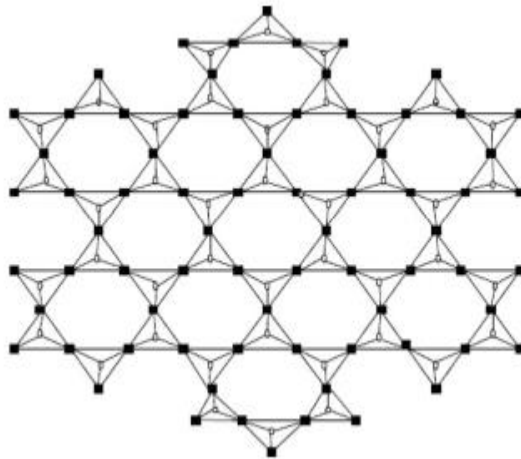
$$EU(DSL(n)) = (12\sqrt{19} + 48\sqrt{13} - 66\sqrt{63} - 468\sqrt{3})n + (54\sqrt{63} + 324\sqrt{3})n^2 - 6\sqrt{19} - 24\sqrt{13} + 24\sqrt{63} + 180\sqrt{3}$$

şeklindedir.

İspat. Dominant silikatta $12n - 6$ tane $(2,3)$ nokta derece çifti, $24n - 12$ tane $(2,6)$ nokta derece çifti, $54n^2 - 66n + 24$ tane $(3,6)$ nokta derece çifti ve $54n^2 - 78n + 30$ tane $(6,6)$ nokta derece çifti bulunmaktadır [21]. Buna göre

$$\begin{aligned} EU(DSL(n)) &= (12n - 6)\sqrt{19} + (24n - 12)2\sqrt{13} + (54n^2 - 66n + 24)\sqrt{63} + (54n^2 - 78n + 30)6\sqrt{3} \\ &= (12\sqrt{19} + 48\sqrt{13} - 66\sqrt{63} - 468\sqrt{3})n + (54\sqrt{63} + 324\sqrt{3})n^2 - 6\sqrt{19} - 24\sqrt{13} + 24\sqrt{63} + 180\sqrt{3} \end{aligned}$$

elde edilir.



Şekil 7. $n = 2$ için Dominant Silikat yapısı [22]

3. Sonuç

Bu çalışmada, Euler Sombor indeksinin kimyasal graflar üzerindeki davranışı detaylı olarak incelenmiş, eşit sayıda noktaya sahip bağlantılı kimyasal graflar ve kimyasal ağaçlar için bu indeksin ekstrem değerleri belirlenmiştir. Elde edilen teoremler aracılığıyla, hangi yapıların Euler Sombor indeksini maksimize veya minimize ettiği açıkça ortaya konmuştur. Özellikle, belirli koşullar altında Euler Sombor indeksinin alt ve üst sınırları elde edilmiş, bu sınırların gerçekleştiği graf yapıları karakterize edilmiştir. Ayrıca bazı örnek kimyasal graflar için yapılan hesaplamalar yapılmıştır. Bu bulgular, kimyasal graf teorisinde moleküler yapının topolojik özelliklerinin daha iyi anlaşılmasına katkı sağlamaktadır. Euler Sombor indeksi, derece tabanlı yapısı sayesinde moleküllerin bağ yapısını yansıtırken, aynı zamanda entalpi ve entropi gibi termodinamik özelliklerle korelasyon kurma potansiyeline de sahiptir. Bu nedenle, çalışmanın sonuçları yalnızca teorik matematik açısından değil, kimya ve malzeme bilimi gibi uygulamalı alanlar için de bir referans niteliğindedir.

ÇIKAR ÇATIŞMASI/ÇAKIŞMASI BİLDİRİMİ

Yazarlar arasında çıkar çatışması/çakışması bulunmamaktadır.

YAZARLARIN KATKI ORANI

Gül Özkan Kızıllırmak: Kavramlaştırma, Araştırma, Makalenin yazımı-Orijinal taslak, İçerik analizi, Makalenin yazımı- İnceleme ve Düzenleme, Makalelin doğruluğunun kontrolü. **Ivan Gutman:** Kavramlaştırma, Metodoloji, Araştırma, İçerik analizi, Makalelin doğruluğunun kontrolü.

KAYNAKLAR

- [1] Gutman, I. (2021). Geometric approach to degree-based topological indices: Sombor indices. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 86, 11–16.
- [2] Das, K.C., Cevik, A.S., Cangul, I.N., Shang, Y. (2021). On Sombor index. *Symmetry*, 13, 140.
- [3] Cruz, R., Gutman, I. and Rada, J. (2021). Sombor index of chemical graphs. *Applied Mathematics and Computation*, 399, 126018.
- [4] Liu, H., Chen, H., Xiao, Q., Fang, X. and Tang, Z. (2021). More on Sombor indices of chemical graphs and their applications to the boiling point of benzenoid hydrocarbons. *International Journal of Quantum Chemistry*, 121(17), e26689.
- [5] Redzepovic, I. (2021). Chemical applicability of Sombor indices. *Journal of Serbian Chemical Society*, 86, 445-457.
- [6] Méndez-Bermúdez, J.A., Aguilar-Sánchez, R., Molina, E.D. and Rodríguez, J.M. (2022). Mean Sombor index. *Discrete Mathematics Letters*, 9, 18–25.
- [7] Kulli, V.R. (2023). Delta Banhatti-Sombor indices of certain networks. *International Journal of Mathematics and Computer Research*, 11, 3875–3881.
- [8] Kulli, V.R. (2023). Modified domination Sombor index and its exponential of a graph. *International Journal of Mathematics and Computer Research*, 11, 3639–3644.
- [9] Du, Z., You, L., Liu, H. and Huang, Y. (2023). The Sombor index and coindex of two-trees. *AIMS Mathematics*, 8, 18982–18994.
- [10] Du, Z., You, L., Liu, H. and Huang, Y. (2024). The Sombor index and coindex of chemical graphs. *Polycyclic Aromatic Compounds*, 44, 2942–2965.
- [11] X. Chen, B. Wu and Z. Li. (2025). Sombor index and elliptic Sombor index of benzenoid systems. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 94, 263-285.
- [12] Gutman, I., Furtula, B. and Oz, M.S. (2024). Geometric approach to vertex degree based topological indices Elliptic Sombor index theory and application. *International Journal of Quantum Chemistry*, 124(2), e27346.
- [13] Özkan Kızıllırmak, G. (2024). Graf İşlemlerinin Eliptik Sombor tamamlayıcı indeksi için sınırlar. *Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Dergisi*, 5(1), 1–10.
- [14] Tang, Z., Li, Y. and Deng, H. (2024). The Euler Sombor index of a graph, *International Journal of Quantum Chemistry*, 124(9), e27387.
- [15] Hu, Y., Fang, J., Liu, Y. and Lin, Z. (2024). Bounds on the Euler Sombor index of maximal outerplanar graphs, *Electronic Journal of Mathematics*, 8, 39–47.
- [16] Gutman, I. (2024). Relating Sombor and Euler indices. *Military Technical Courier*, 72(1), 1–12.

- [17] Hayat, S., Arshad, M., Khan, A. (2023). Graphs with given connectivity and their minimum Sombor index having applications to QSPR studies of monocarboxylic acids. *Heliyon*, 10, e23392.
- [18] Shashidhara, A.A., Ahmed, H., Nandappa, S. and Cancan, M. (2023). Domination version: Sombor index of graphs and its significance in predicting physicochemical properties of butane derivatives. *Eurasian Chemistry Communications*, 5, 91–102.
- [19] Cruz R., Gutman I., Rada J. (2021). Sombor index of chemical graphs. *Applied Mathematics and Computation*, 399, 126018.
- [20] Afzal, H.U., Fatima, T. (2019). On Topological Indices of $OT[m, n]$ Octagonal Tillings and TiO_2 Nanotubes. *Acta Chimica Slovenica*, 66, 435–442.
- [21] Aqib, M., Ali Malik, M., Usman Afzal, H., Fatima, T. and Ali, Y. (2023). On topological indices of some chemical graphs. *Molecular Physics*, e2276386.
- [22] Baig, A.Q., Imran, M., Ali, H. (2015). On topological indices of poly oxide, poly silicate, DOX, and DSL networks. *Canadian Journal of Chemistry*, 730–739.