57º SBPO
SIMPÓSIO BRASILEIRO DE PESQUISA OPERACIONAL
Gramado • RS
DE 5 A 9 DE OUTUBRO DE 2025

# Caracterização topológica de dendrímeros via índices complementares: uma abordagem matemático-estrutural

**Diego Julio Pacheco**
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro
Av. Alberto Lamego, 2000, Parque Califórnia, Campos dos Goytacazes / RJ
diego.pacheco@uenf.br

**Vitor S. Ponciano**
IME-Universidade Federal Fluminense
Rua Professor Marcos Waldemar de Freitas Reis, s/n, São Domingos, Niterói - RJ
vitor_ponciano@id.uff.br

**Rafael Oliveira, Augusto Parisot**
Centro de Análises de Sistemas Navais- Rio de Janeiro, RJ
rafael-silva.oliveira@marinha.mil.br, parisot@marinha.mil.br

**RESUMO**

Os índices topológicos destacam-se como descritores moleculares essenciais na química teórica, nanotecnologia e modelagem molecular, conectando propriedades estruturais a características físico-químicas. Recentemente, avanços na teoria dos grafos têm ampliado o potencial desses índices, revelando novas relações matemáticas e aplicações práticas. Neste estudo, investigamos sistematicamente quatro índices topológicos complementares – recentemente propostos, porém ainda inexplorados – para uma classe especial de grafos químicos: os dendrímeros. Mediante abordagens combinadas da teoria dos grafos e química matemática, derivamos expressões analíticas fechadas para os índices complementares de Zagreb, Esquecido, geométrico-aritmético e Zagreb aumentado em três famílias distintas de dendrímeros. Estes resultados não apenas preenchem uma lacuna teórica importante, mas também estabelecem relações quantitativas entre a arquitetura dendrimérica e suas propriedades moleculares.

**PALAVRAS CHAVE. Índice Topológico, Teoria de Grafos, dendrímeros.**

**Tópicos. Outras Aplicações em PO, Teoria dos Grafos e Algoritmos Relacionados.**

**ABSTRACT**

Topological indices stand out as essential molecular descriptors in theoretical chemistry, nanotechnology, and molecular modeling, bridging structural properties with physicochemical characteristics. Recent advances in graph theory have expanded the potential of these indices, uncovering new mathematical relationships and practical applications. In this study, we systematically investigate four complementary topological indices—recently proposed yet still underexplored—for a special class of chemical graphs: dendrimers. Through combined approaches from graph theory and mathematical chemistry, we derive closed-form analytical expressions for the complementary Zagreb, Forgotten, geometric-arithmetic, and augmented Zagreb indices across three distinct dendrimer families. These results not only address a critical theoretical gap but also establish quantitative relationships between dendrimeric architecture and molecular properties.

**KEYWORDS. Topological Index, Graph Theory, Dendrimers.**

**Paper topics. Other OR Applications, Graph Theory and Related Algorithms.**

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

## 1. Introdução

Descritores moleculares são ferramentas matemáticas fundamentais que traduzem a estrutura das moléculas em informações quantitativas, essenciais para a previsão de propriedades físico-químicas, toxicológicas e biológicas em sistemas complexos [Dimitrov, 2013]. Moléculas e compostos moleculares podem ser representados por grafos moleculares — estruturas em que os átomos são modelados como vértices e as ligações químicas como arestas. Dentre os diversos tipos de descritores, os índices topológicos têm se destacado por sua capacidade de capturar aspectos estruturais relevantes das moléculas.

Nos últimos anos, descritores moleculares e índices topológicos consolidaram-se como ferramentas essenciais na química teórica e no planejamento de fármacos, viabilizando a caracterização quantitativa de estruturas químicas e a predição de propriedades por meio de modelos de relações estrutura-atividade (QSAR) e estrutura-propriedade (QSPR) [Todeschini e Consonni, 2009], [Devillers e Balaban, 1999]. Derivados da teoria dos grafos, esses descritores convertem informações estruturais em valores numéricos, o que facilita análises computacionais e a redução de custos em pesquisas experimentais.

A topologia molecular, em particular, oferece uma representação simplificada das moléculas por meio de grafos, permitindo a definição de diversos índices. Entre os mais conhecidos estão os índices de Wiener, Randić e Zagreb, cada um projetado para capturar diferentes aspectos da conectividade e complexidade molecular [Devillers e Balaban, 1985] [Gutman e Furtula, 2015]. Esses índices têm sido amplamente aplicados para correlacionar características estruturais com propriedades como polaridade, solubilidade e atividade biológica.

Entre os descritores mais utilizados, destacam-se aqueles baseados em distâncias, como o índice de Wiener, que calcula a soma dos menores caminhos entre todos os pares de átomos de uma molécula [Wiener, 1947]. O índice de Randić, por sua vez, avalia o impacto das ramificações moleculares e tem aplicação na previsão de propriedades termodinâmicas [Randić, 1975]. Já o índice de Hosoya, baseado em autovalores da matriz de adjacência, tem demonstrado utilidade em estudos sobre aromaticidade e estabilidade molecular [Hosoya, 1971].

Recentemente, [Furtula e Oz, 2025] propuseram uma nova abordagem geométrica para a formulação de índices topológicos, introduzindo o conceito de índice topológico complementar, baseado nos graus dos vértices. Seja $G = (V, E)$ um grafo simples não-direcionado de ordem $n = |V|$ e tamanho $m = |E|$. Sejam os vértices $u, v \in V(G)$, a aresta $uv \in E(G)$ e $d(u)$, $d(v)$ sendo os respectivos graus dos vértices $u$ e $v$.

Tabela 1: Índices topológicos baseados em grau e seus complementares. Considere $d(u) \geq d(v)$. Fonte: adaptado de [Furtula e Oz, 2025].

| Definição | Índice Complementar |
|---|---|
| $M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} d(u) \cdot d(v)$ | $cM_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 - d(v)^2)$ |
| $F(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 + d((v)^2)$ | $cF(G) = 2 \cdot F(G) = 2 \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 + d(v)^2)$ |
| $GA(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u) \cdot d(v)}}{d(u) + d(v)}$ | $cGA(G) = \sum_{uv \in E(G)} \frac{\sqrt{d(u)^2 - d(v)^2}}{d(u)}$ |
| $AZI(G) = \sum_{uv \in E(G)} \left( \frac{d(u) \cdot d(v)}{d(u) + d(v) - 2} \right)^3$ | $cAZI(G) = \frac{1}{8} \sum_{uv \in E(G)} \left( \frac{d(u)^2 - d(v)^2}{d(u) - 1} \right)^3$ |

A Tabela 1 apresenta as definições de alguns índices topológicos clássicos amplamente

DOI: 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

utilizados na literatura — o segundo índice de Zagreb $M_2(G)$, o índice esquecido $F(G)$, o índice geométrico-aritmético $GA(G)$ e o índice de Zagreb aumentado $AZI(G)$ — juntamente com suas versões complementares propostas na nova abordagem.

O objetivo deste trabalho é calcular os índices topológicos complementares correspondentes ao segundo índice de Zagreb, ao índice esquecido, ao índice geométrico-aritmético e ao índice de Zagreb aumentado, considerando estruturas de grafos químicos conhecidas como dendrímeros, sendo estas: Dendrímero de porfirina, Dendrímero de éter propil imina PETIM e Dendrímero de porfirina de zinco. Essa análise visa investigar o comportamento desses novos descritores em topologias moleculares altamente ramificadas, com potencial aplicação na modelagem de propriedades moleculares.

## 2. Grafos químicos: o caso dos dendrímeros

Os dendrímeros constituem uma classe de polímeros hiperramificados de arquitetura tridimensional altamente ordenada, definidos por sua simetria radial, monodispersidade e controle estrutural preciso em nível molecular [Tomalia et al., 1985]. Essas macromoléculas são sintetizadas por metodologias iterativas que permitem a expansão regular da cadeia polimérica a partir de um núcleo multifuncional, originando camadas sucessivas de unidades repetitivas denominadas gerações [Mintzer e Grinstaff, 2011]. A uniformidade de tamanho e a densidade funcional na superfície conferem aos dendrímeros propriedades únicas, razão pela qual também são referenciados na literatura como "moléculas em cascata" ou "arquiteturas nanoscópicas" [Mintzer e Grinstaff, 2011].

A morfologia dendrimérica distingue-se por três domínios estruturais interdependentes: (i) um núcleo central multifuncional, usualmente contendo dois ou mais grupos reativos; (ii) uma zona interna composta por blocos de ramificação organizados em níveis hierárquicos (gerações), dispostos radialmente em torno do núcleo; e (iii) uma interface externa funcionalizada, constituída por múltiplos grupos terminais passíveis de modificações químicas específicas, como descrito por Fréchet [Fréchet, 1994]. Essa configuração confere aos dendrímeros alta densidade superficial e capacidade de encapsulamento molecular tanto no interior quanto na periferia da estrutura.

Do ponto de vista sintético, a obtenção de dendrímeros pode ser realizada por abordagens divergente ou convergente. A rota divergente, inicialmente proposta por Tomalia, consiste na propagação da estrutura a partir do núcleo para a periferia, permitindo a expansão geométrica por meio de reações sequenciais de adição [Tomalia et al., 1985]. Em contraste, a abordagem convergente, desenvolvida posteriormente, baseia-se na síntese de dendrons (fragmentos ramificados) que são posteriormente acoplados ao núcleo central, oferecendo maior controle sobre defeitos estruturais [Duncan e Izzo, 2005]. A escolha da rota sintética influencia diretamente na pureza, rendimento e funcionalidade final do polímero.

Além da complexidade estrutural, os dendrímeros exibem propriedades fisicoquímicas que os tornam candidatos versáteis para aplicações em nanotecnologia e biotecnologia. A elevada densidade de grupos funcionais, a baixa polidispersidade e a solubilidade modulável são características fundamentais que favorecem sua aplicação como nanocarreadores em sistemas de liberação controlada de fármacos [Wolinsky e Grinstaff, 2008]. Tais sistemas têm demonstrado vantagens em termos de aumento da biodisponibilidade, direcionamento específico de agentes terapêuticos, redução da toxicidade sistêmica e liberação responsiva a estímulos fisiológicos [Kesharwani et al., 2014].

Na prática clínica e pré-clínica, dendrímeros têm sido amplamente explorados em áreas como terapia anticâncer, administração de ácidos nucleicos, imagem molecular, desenvolvimento de vacinas e engenharia de tecidos [Jain, 2010]. A versatilidade funcional dessas nanoplataformas

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

permite o design racional de agentes terapêuticos multifuncionais, capazes de integrar diagnóstico e tratamento em uma única entidade (nanomedicina theranóstica).

## 3. Resultados

Sejam os dendrímeros definidos como $D_1[n]$, $D_2[n]$ e $D_3[n]$ apresentados nas Figuras 1, 2 e 3, respectivamente. A seguir, calculamos os quatro índices topológicos complementares para os respectivos grafos dendrímeros. Nós próximos teoremas, definimos os respectivos valores dos índices topológicos complementares para as três famílias de dendrímeros.

Inicialmente, calculamos o segundo índice complementar de Zagreb para os três tipos de dendrímeros, conforme o teorema abaixo.

**Teorema 2.1** *O segundo índice complementar de Zagreb $cM_2(G)$ para os grafos dendrímeros nanostar $D_1[n]$, $D_2[n]$ e $D_3[n]$ são definidos como:*

$$cM_2(D_1[n]) = 672n - 30 \tag{1}$$
$$cM_2(D_2[n]) = 36 \times 2^n - 30 \tag{2}$$
$$cM_2(D_3[n]) = 200 \times 2^n - 52. \tag{3}$$

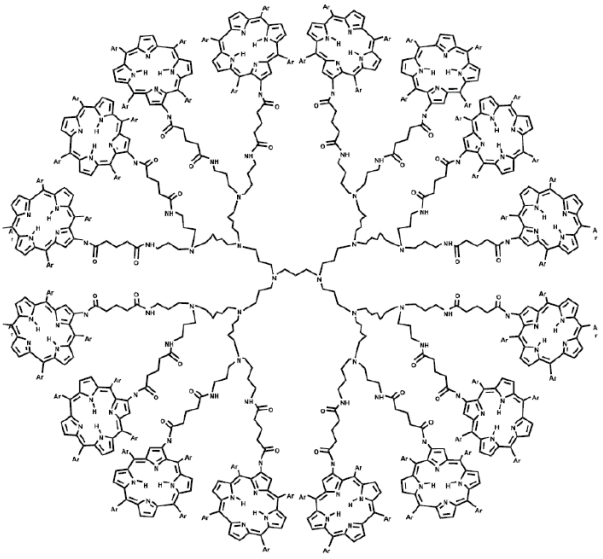


Figura 1: Dendrímero de porfirina $D_1[n]$ (Fonte: Adaptado de [Kulli, 2019]).

**Prova.** O grafo $D_1[n]$ (Figura 1), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 2. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cM_2(S_1[n]) &= \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 - d(v)^2) \\ &= n_{31}(3^2 - 1^2) + n_{41}(4^2 - 1^2) + n_{22}(2^2 - 2^2) + n_{32}(3^2 - 2^2) + n_{33}(3^2 - 3^2) \\ &+ n_{43}(4^2 - 3^2) \\ &= (2n)(8) + (24n)(15) + (48n - 6)(5) + (8n)(7) \\ &= 672n - 30. \end{aligned}$$

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

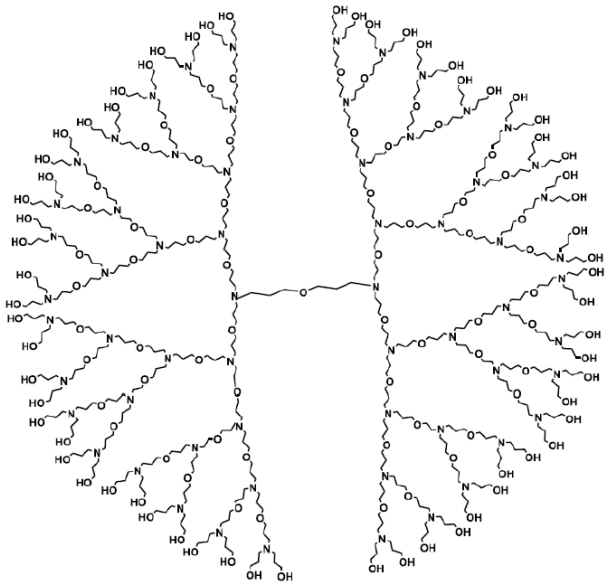


Figura 2: Dendrímero de éter propil imina PETIM $D_2[n]$ (Fonte: adaptado de [Kulli, 2019]).

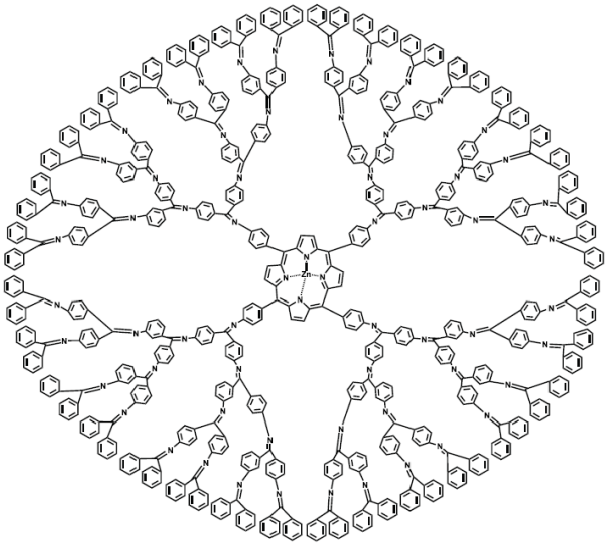


Figura 3: Dendrímero de porfirina de zinco $D_3[n]$ (Fonte: adaptado de [Kulli, 2019]).

O grafo $D_2[n]$ (Figura 2), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cM_2(D_2[n]) &= \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 - d(v)^2) \\ &= n_{21}(2^2 - 1^2) + n_{22}(2^2 - 2^2) + n_{32}(3^2 - 2^2) \\ &= (2^{n+1})(3) + (6 \times 2^n - 6)(5) \\ &= 36 \times 2^n - 30. \end{aligned}$$

O grafo $D_3[n]$ (Figura 3), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas con-

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

Tabela 2: Separação de arestas do grafo $D_1[n]$, com base em $(d(u), d(v))$(Fonte: Elaborado pelos autores).

| $(d(u), d(v))$, onde $uv \in E\, D_1[n]$ | Número de arestas $(n_{ij})$ |
|---|---|
| $(3, 1)$ | $2n$ |
| $(4, 1)$ | $24n$ |
| $(2, 2)$ | $10n - 5$ |
| $(3, 2)$ | $48n - 6$ |
| $(3, 3)$ | $13n$ |
| $(3, 4)$ | $8n$ |

Tabela 3: Separação de arestas do grafo $D_2[n]$, com base em $(d(u), d(v))$(Fonte: Elaborado pelos autores).

| $(d(u), d(v))$, onde $uv \in E\, D_2[n]$ | Número de arestas $(n_{ij})$ |
|---|---|
| $(2, 1)$ | $2^{n+1}$ |
| $(2, 2)$ | $2^{n+4} - 18$ |
| $(3, 2)$ | $6 \times 2^n - 6$ |

Tabela 4: Separação de arestas do grafo $D_3[n]$, com base em $(d(u), d(v))$ (Fonte: Elaborado pelos autores).

| $(d(u), d(v))$, onde $uv \in E\, D_3[n]$ | Número de arestas $(n_{ij})$ |
|---|---|
| $(2, 2)$ | $16 \times 2^n - 4$ |
| $(3, 2)$ | $40 \times 2^n - 16$ |
| $(3, 3)$ | $8 \times 2^n + 12$ |
| $(4, 3)$ | $4$ |

forme a Tabela 4. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cM_2(D_3[n]) &= \sum_{uv \in E(G)} (d(u)^2 - d(v)^2) \\ &= n_{22}(2^2 - 2^2) + n_{32}(3^2 - 2^2) + n_{33}(3^2 - 3^2) + n_{43}(4^2 - 3^2) \\ &= (40 \times 2^n - 16)(5) + (4)(7) \\ &= 200 \times 2^n - 52. \end{aligned}$$

Assim, obtemos os resultados. □

No próximo teorema, calculamos os índice complementar Esquecido $cF(G)$ para as famílias de grafos dendrímeros.

**Teorema 2.2** *O índice complementar Esquecido $cF(G)$ para os grafos dendrímeros $D_1[n]$, $D_2[n]$ e $D_3[n]$ são definidos como:*

$$cF(D_1[n]) = 3132n - 236 \tag{4}$$
$$cF(D_2[n]) = 432 \times 2^n - 444 \tag{5}$$
$$cF(D_3[n]) = 1584 \times 2^n + 152. \tag{6}$$

**Prova.** O grafo $D_1[n]$ (Figura 1), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

conforme a Tabela 2. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cF(D_1[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} 2(d(u)^2 + d(v)^2) \\ &= 2\left[n_{31}(3^2+1^2) + n_{41}(4^2+1^2) + n_{22}(2^2+2^2)\right] \\ &+ 2\left[n_{32}(3^2+2^2) + n_{33}(3^2+3^2) + n_{34}(3^2+4^2)\right] \\ &= 2\left[(2n)(10) + (24n)(17) + (10n-5)(8) + (48n-6)(13) + (13n)(18) + (8n)(25)\right] \\ &= 3132n - 236. \end{aligned}$$

O grafo $D_2[n]$ (Figura 2), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cF(D_2[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} 2(d(u)^2 + d(v)^2) \\ &= 2\left[n_{21}(2^2+1^2) + n_{22}(2^2+2^2) + n_{32}(3^2+2^2)\right] \\ &= 2\left[(2^{n+1})(5) + (2^{n+4}-18)(8) + (6\times 2^n - 6)(13)\right] \\ &= 432\times 2^n - 444. \end{aligned}$$

O grafo $D_3[n]$ (Figura 3), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$\begin{aligned} cF(D_3[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} 2(d(u)^2 + d(v)^2) \\ &= 2\left[n_{22}(2^2+2^2) + n_{32}(3^2+2^2) + n_{33}(3^2+3^2) + n_{43}(4^2+3^2)\right] \\ &= 2\left[(16\times 2^n - 4)(8) + (40\times 2^n - 16)(13) + (8\times 2^n + 12)(18) + (4)(25)\right] \\ &= 1584\times 2^n + 152. \end{aligned}$$

Assim, obtemos os resultados. □

No próximo teorema, calculamos os índice complementar geométrico-aritmético $(cGA(G))$ para as famílias de grafos dendrímeros.

**Teorema 2.3** *O índice complementar geométrico-aritmético* $(cGA(G))$ *para os grafos dendrímeros* $D_1[n]$, $D_2[n]$ *e* $D_3[n]$ *são definidos como:*

$$cGA(D_1[n]) = \left(\sqrt{10} + \frac{48\sqrt{17}}{5} + 18\sqrt{2} + \frac{96\sqrt{13}}{5} + \frac{80}{7}\right)n - \frac{12\sqrt{13}}{5} \tag{7}$$

$$cGA(D_2[n]) = \left(\frac{4\sqrt{2}}{3} + 16 + \frac{12\sqrt{6}}{5}\right)2^n - \left(18 + \frac{12\sqrt{6}}{5}\right) \tag{8}$$

$$cGA(D_3[n]) = \frac{80\sqrt{5}}{3}2^n - \frac{32\sqrt{5}}{3} + 2\sqrt{7}. \tag{9}$$

**Prova.** O grafo $D_1[n]$ (Figura 1), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 2. Então, temos que:

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

$$
\begin{aligned}
cGA(D_1[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u)^2+d(v)^2}}{d(u)+d(v)} \\
&= n_{31}\frac{2\sqrt{3^2+1^2}}{3+1} + n_{41}\frac{2\sqrt{4^2+1^2}}{4+1} + n_{22}\frac{2\sqrt{2^2+2^2}}{2+2} \\
&+ n_{32}\frac{2\sqrt{3^2+2^2}}{3+2} + n_{33}\frac{2\sqrt{3^2+3^2}}{3+3} + n_{34}\frac{2\sqrt{3^2+4^2}}{3+4} \\
&= (2n)\frac{2\sqrt{10}}{4} + (24n)\frac{2\sqrt{17}}{5} + (10n-5)\frac{2\sqrt{8}}{4} + (48n-6)\frac{2\sqrt{13}}{5} \\
&+ (13n)\frac{2\sqrt{18}}{6} + (8n)\frac{2\sqrt{25}}{7} \\
&= \left(\sqrt{10} + \frac{48\sqrt{17}}{5} + 18\sqrt{2} + \frac{96\sqrt{13}}{5} + \frac{80}{7}\right)n - \frac{12\sqrt{13}}{5}.
\end{aligned}
$$

O grafo $D_2[n]$ (Figura 3), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$
\begin{aligned}
cGA(D_2[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u)d(v)}}{d(u)+d(v)} \\
&= n_{21}\frac{2\sqrt{2\times 1}}{2+1} + n_{22}\frac{2\sqrt{2\times 2}}{2+2} + n_{32}\frac{2\sqrt{3\times 2}}{3+2} \\
&= (2^{n+1})\frac{2\sqrt{2}}{3} + (2^{n+4}-18)\frac{2\sqrt{4}}{4} + (6\times 2^n - 6)\frac{2\sqrt{6}}{5} \\
&= \left(\frac{4\sqrt{2}}{3} + 16 + \frac{12\sqrt{6}}{5}\right)2^n - \left(18 + \frac{12\sqrt{6}}{5}\right).
\end{aligned}
$$

O grafo $D_3[n]$ (Figura 3), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$
\begin{aligned}
cGA(D_3[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u)^2-d(v)^2}}{d(u)} \\
&= n_{22}\frac{2\sqrt{2^2-2^2}}{2} + n_{32}\frac{2\sqrt{3^2-2^2}}{3} + n_{33}\frac{2\sqrt{3^2-3^2}}{3} + n_{43}\frac{2\sqrt{4^2-3^2}}{4} \\
&= (16\times 2^n - 4)\frac{2\sqrt{0}}{2} + (40\times 2^n - 16)\frac{2\sqrt{5}}{3} + (8\times 2^n + 12)\frac{2\sqrt{0}}{3} + (4)\frac{2\sqrt{7}}{4} \\
&= \frac{80\sqrt{5}}{3}2^n - \frac{32\sqrt{5}}{3} + 2\sqrt{7}.
\end{aligned}
$$

Assim, obtemos os resultados. □

No próximo teorema, calculamos o índice complementar de Zagreb aumentado $(cAZI(G))$ para as famílias de grafos dendrímeros.

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

**Teorema 2.4** *O segundo índice complementar de Zagreb aumentado* $(cAZI(G))$ *para os grafos dendrímeros* $D_1[n]$*,* $D_2[n]$ *e* $D_3[n]$ *são definidos como:*

$$cAZI(D_1[n]) = \frac{534917n}{512} - \frac{3637}{36} \tag{10}$$

$$cAZI(D_2[n]) = \frac{3965 \times 2^{n+1} - 7381}{36} \tag{11}$$

$$cAZI(D_3[n]) = \frac{135211 \times 2^{n+1} + 1921}{432}. \tag{12}$$

**Prova.** O grafo $D_1[n]$ (Figura 2), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 2. Então, temos que:

$$\begin{aligned}
cAZI(D_1[n]) &= \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{8}\left(\frac{d(u)^2 + d(v)^2}{d(u) + d(v) - 2}\right)^3 \\
&= n_{31}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+1^2}{3+1-2}\right)^3 + n_{41}\frac{1}{8}\left(\frac{4^2+1^2}{4+1-2}\right)^3 + n_{22}\frac{1}{8}\left(\frac{2^2+2^2}{2+2-2}\right)^3 \\
&\quad + n_{32}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+2^2}{3+2-2}\right)^3 + n_{33}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+3^2}{3+3-2}\right)^3 + n_{34}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+4^2}{3+4-2}\right)^3 \\
&= (2n)\frac{1}{8}\left(\frac{9+1}{2}\right)^3 + (24n)\frac{1}{8}\left(\frac{16+1}{3}\right)^3 + (10n-5)\frac{1}{8}\left(\frac{4+4}{2}\right)^3 \\
&\quad + (48n-6)\frac{1}{8}\left(\frac{9+4}{3}\right)^3 + (13n)\frac{1}{8}\left(\frac{9+9}{4}\right)^3 + (8n)\frac{1}{8}\left(\frac{9+16}{5}\right)^3 \\
&\quad + (48n-6)\frac{1}{8}\left(\frac{2197}{27}\right) + (13n)\frac{1}{8}\left(\frac{729}{64}\right) + (8n)\frac{1}{8}(5)^3 \\
&= (2n)\frac{125}{8} + (24n)\frac{4913}{216} + (10n-5)\frac{64}{8} + (48n-6)\frac{2197}{216} + (13n)\frac{729}{512} + (8n)\frac{125}{8} \\
&= \left(\frac{125}{4} + \frac{4913}{9} + 80 + \frac{2197}{9} + \frac{9477}{512} + 125\right)n - 40 - \frac{2197}{36} \\
&= \frac{534917n}{512} - \frac{3637}{36}.
\end{aligned}$$

O grafo $D_2[n]$ (Figura 2), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 3. Então, temos que:

$$\begin{aligned}
cAZI(D_2[n]) &= \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{8}\left(\frac{d(u)^2 + d(v)^2}{d(u) + d(v) - 2}\right)^3 \\
&= n_{21}\frac{1}{8}\left(\frac{2^2+1^2}{2+1-2}\right)^3 + n_{22}\frac{1}{8}\left(\frac{2^2+2^2}{2+2-2}\right)^3 + n_{32}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+2^2}{3+2-2}\right)^3 \\
&= 2^{n+1}\left(\frac{125}{8}\right) + 8(2^{n+4} - 18) + \frac{2197}{216}(6 \times 2^n - 6). \\
&= \frac{3965 \times 2^{n+1} - 7381}{36}.
\end{aligned}$$

O grafo $D_3[n]$ (Figura 3), possui os tipos de arestas e suas respectivas quantidades deduzidas conforme a Tabela 4. Então, temos que:

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

$$
\begin{aligned}
cAZI(D_3[n]) &= \sum_{uv\in E(G)} \frac{1}{8}\left(\frac{d(u)^2+d(v)^2}{d(u)+d(v)-2}\right)^3 \\
&= n_{22}\frac{1}{8}\left(\frac{2^2+2^2}{2+2-2}\right)^3 + n_{32}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+2^2}{3+2-2}\right)^3 + n_{33}\frac{1}{8}\left(\frac{3^2+3^2}{3+3-2}\right)^3 \\
&+ n_{43}\frac{1}{8}\left(\frac{4^2+3^2}{4+3-2}\right)^3 \\
&= 8(16\times 2^n-4) + \frac{2197}{216}(40\times 2^n-16) + \frac{5832}{512}(8\times 2^n+12) + \frac{125}{2} \\
&= \frac{135211\times 2^{n+1}+1921}{432}.
\end{aligned}
$$

Assim, obtemos os resultados.

□

## 3. Conclusões

Neste trabalho, realizamos uma análise abrangente de quatro índices topológicos complementares aplicados a estruturas dendriméricas, contribuindo de forma inédita para o entendimento matemático e químico dessas macromoléculas altamente ramificadas. As expressões analíticas fechadas obtidas para os índices de Zagreb complementar, Esquecido complementar, geométrico-aritmético complementar e Zagreb aumentado complementar oferecem ferramentas quantitativas precisas para a caracterização estrutural de três famílias representativas de dendrímeros.

Os resultados sugerem que tais índices complementares podem ser particularmente úteis no design racional de dendrímeros com propriedades ajustáveis para aplicações em nanotecnologia, farmacologia e ciência dos materiais. Dessa forma, o presente estudo fortalece o elo entre matemática discreta e modelagem molecular, abrindo perspectivas promissoras para investigações futuras envolvendo outras arquiteturas macromoleculares complexas.

## Referências

Devillers, J.; Balaban, A. T. *Chemical Applications of Graph Theory*. Academic Press, 1985.

Devillers, J.; Balaban, A. T. (Eds.) *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*. Gordon and Breach, 1999.

Dimitrov, D. Efficient computation of trees with minimal atom-bond connectivity index. *Applied Mathematics and Computation*, 224: 663–670, 2013.

Duncan, R.; Izzo, L. Dendrimer biocompatibility and toxicity. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 57(15):2215–2237, 2005.

Fréchet, J. M. J. Functional polymers and dendritic polymers: Reactivity and applications. *Science*, 263(5154):1710–1715, 1994.

Furtula, B.; Oz, M. S. Complementary Topological Indices. *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 93(1):247–263, 2025.

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br

Gutman, I.; Furtula, B. Recent Results in the Theory of Randić Index. *Graph Theory Notes of New York*, 68:10-18, 2015.

Hosoya, H. Topological Index. A Newly Proposed Quantity Characterizing the Topological Nature of Structural Isomers of Saturated Hydrocarbons. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 44(9):2332-2339, 1971.

Jain, K. K. Nanomedicine: Application of nanobiotechnology in medical practice. *Medical Principles and Practice*, 19(2):89–101, 2010.

Kesharwani, P.; Gajbhiye, V.; Jain, N. K. A review of nanocarriers for the delivery of small interfering RNA: Challenges and strategies. *Nanomedicine*, 9(3):485–503, 2014.

Kulli, V. R. Minus F and Square F-Indices and Their Polynomials of Certain Dendrimers. *Earthline Journal of Mathematical Sciences*, 1(2): 171–185, 2019.

Mintzer, M. A.; Grinstaff, M. W. Biomedical applications of dendrimers: A tutorial. *Chemical Society Reviews*, 40(1):173–190, 2011.

Randić, M. On Characterization of Molecular Branching. *Journal of the American Chemical Society*, 97(23):6609-6615, 1975.

Todeschini, R.; Consonni, V. *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*. Wiley-VCH, 2009.

Tomalia, D. A.; Baker, H.; Dewald, J.; Hall, M.; Kallos, G.; Martin, S.; Roeck, J.; Ryder, J.; Smith, P. A New Class of Polymers: Starburst-Dendritic Macromolecules. *Polymer Journal*, 17(1):117–132, 1985.

Tomalia, D. A.; Naylor, A. M.; Goddard, W. A. Starburst Dendrimers: Molecular-Level Control of Size, Shape, Surface Chemistry, Topology, and Flexibility. *Angewandte Chemie International Edition*, 29(2):138–175, 1990.

Wiener, H. Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal of the American Chemical Society*, 69(1):17-20, 1947.

Wolinsky, J. B.; Grinstaff, M. W. Drug delivery systems from the laboratory to the clinic: Barriers to uptake and the future of drug delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 60(11):1037–1055, 2008.

**DOI:** 10.59254/sbpo-2025-212404
https://proceedings.science/p/212404?lang=pt-br