بسم الله الرحمن الرحيم

بسمه تعالی

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم ریاضی

تأییدیه اعضای هیأت داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اعضای هیأت داوران نسخهٔ نهایی پایان‌نامه **خانم ندا ساری** رشته **ریاضی‌محض** تحت عنوان: **«اندیس وارون معکوس وینر بعضی از نانولوله‌ها و نانو چنبره‌ها»** را از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آن را برای اخذ درجهٔ کارشناسی‌ارشد مورد تأیید قرار دادند.

اعضای هیأت داوران	نام و نام‌خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	دکتر علی ایرانمنش	استاد	
۲- استاد ناظر داخلی	دکتر سیدمحمد باقری	دانشیار	
۳- استاد ناظر داخلی	دکتر سیداحمد موسوی	دانشیار	
۴- استاد ناظر خارجی	دکتر محمدعلی ایرانمنش	دانشیار	
۵- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر سیداحمد موسوی	دانشیار	

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته **ریاضی محض** است که در سال ۱۳۸۹ در دانشکده **علوم ریاضی** دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای دکتر **علی ایرانمنش**، از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب **ندا ساری** دانشجوی رشته **ریاضی محض** مقطع **کارشناسی ارشد** تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: ندا ساری

تاریخ و امضا: ۹۰/۳/۱۵

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب **ندا ساری** دانشجوی رشته **ریاضی محض** ورودی سال تحصیلی **۱۳۸۷** مقطع **کارشناسی ارشد** دانشکده **علوم ریاضی** متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم.»

امضا:

تاریخ: ۹۰/۳/۱۵

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم ریاضی

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشدریاضی(محض)

اندیس وارون معکوس وینر بعضی از نانو لوله‌ها و نانو چنبره‌ها

توسط

ندا ساری

استاد راهنما

دکتر علی ایرانمنش

اسفند ۱۳۸۹

در اینجا لازم می‌دانم از استاد گرامی خود جناب آقای دکتر ایرانمش که در تمام مدت تحصیل در این دوره و تهیه این پایان نامه صبورانه مشوق و حامی اینجانب بوده و زحمات زیادی را در این زمینه متقبل شده‌اند کمال تشکر و قدردانی را داشته باشم. همچنین از تمامی دوستان دوران تحصیل که با لطف و محبت خود من را در این راه کمک نموده‌اند سپاسگذاری می‌کنم. به ویژه از لطف و حمایت بی‌کران خانواده‌ام تشکر و سپاس فراوان دارم.

چکیده

فرض کنیم G گراف همبند ساده با مجموعه رئوس $\{v_1,...,v_n\}$ و قطر d باشد. هرگاه d_{ij} نشان دهنده فاصله بین رئوس v_i و v_j در گراف G باشد، ماتریس وارون معکوس وینر RRW، G ماتریس $[rr_{ij}]_{n\times n}$ است که $rr_{ij}=\frac{1}{d-d_{ij}}$ اگر $i\neq j$ و $d_{ij}<d$ و در غیر این صورت ۰ است. اندیس وارون معکوس وینر به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$R\Lambda(G)=\sum_{i<j} rr_{ij}$$

در این پایان نامه، ابتدا کران‌های بالا و پایین $R\Lambda(G)$ و سپس اندیس وارون معکوس وینر نانو لوله و نانو چنبره $TUC_4C_8(R)$ و $TUC_4C_8(R)$ محاسبه شده است. همچنین کران‌هایی برای ماکزیمم مقدار ویژه ماتریس وارون معکوس وینر یک گراف همبند G داده شده است.

کلمات کلیدی : اندیس وارون معکوس وینر، نانولوله، نانوچنبره، ماکزیمم مقدار ویژه.

فهرست مطالب

مقدمه..... ۱

فصل اول : تعاریف و مفاهیم اولیه

۱-۱ آشنایی با برخی از مفاهیم و تعاریف مورد نیاز..... ۳

۱-۲ اندیس های توپولوژیکی و اهمیت آن..... ۹

۱-۳ فناوری نانو..... ۱۰

۱-۴ بعضی از اندیس‌های توپولوژیکی..... ۱۱

فصل دوم: کران اندیس وارون معکوس وینر و مقایسه آن با اندیس وینر

۲-۱ کران اندیس وارون معکوس وینر..... ۱۵

۲-۲ مقایسه کران‌های اندیس وینر و اندیس وارون معکوس وینر..... ۲۴

فصل سوم: محاسبه اندیس وارون معکوس وینرنانولوله و نانوچنبره TUC_4C_8

۳-۱ معرفی TUC_4C_8..... ۲۸

۳-۲ محاسبه اندیس وارون معکوس وینر نانولوله $TUC_4C_8(S)$ ۲۹

۳-۳ محاسبه اندیس وارون معکوس وینر نانوچنبره $TUC_4C_8(S)$ ۳۷

۴-۳ محاسبه اندیس وارون معکوس وینر نانولوله $TUC_4C_8(R)$ ۴۲

۵-۳ محاسبه اندیس وارون معکوس وینر نانوچنبره $TUC_4C_8(R)$ ۴۷

فصل چهارم: کران‌هایی برای ماکزیمم مقدار ویژه ماتریس وارون معکوس وینر و کران بهبود یافته اندیس وارون معکوس وینر

۴-۱ کران‌هایی برای ماکزیمم مقدار ویژه ماتریس وارون معکوس وینر..... ۵۴

۴-۲ کران‌های بهبود یافته اندیس وارون معکوس وینر ۵۹

کتاب نامه ۶۲

واژه نامه ۶۴

پیوست الف ۶۶

پیوست ب ۷۰

پیوست پ ۷۳

پیوست ت ۷۷

فهرست اشکال

۱-۱-۱ گرافی برای آشنایی با طوقه و یال‌های چندگانه..... ۴

۱-۱-۲ K_5..... ۶

۱-۱-۳ S_6..... ۷

۱-۳-۱ TUC_4C_8..... ۱۱

۱-۴-۱-۱گراف G مثال ۱-۴-۱-۱..... ۱۲

۲-۱-۱ گراف G مثال ۲-۱-۳..... ۱۷

۲-۱-۲ گراف Y_5..... ۱۹

۲-۲-۱طریقه ساختن H..... ۲۵

۲-۲-۲طریقه ساختن H'..... ۲۵

۳-۱-۱ نانولوله $TUC_4C_8(R)$ و $TUC_4C_8(S)$..... ۲۹

۳- ۲ -۱یک ردیف دسته صندلی..... ۲۹

۳-۲-۲ TU(S)(۴،۶)..... ۳۰

۳-۳-۱ T(S)(۴،۶) ۳۷

۳-۴-۱ TU(R)(۴،۳) ۴۲

۳-۴-۲ نام‌گذاری رئوس لوزی $R_{i,k}$ ۴۳

۳-۵-۱ T (R)(۴،۳) ۴۷

مقدمه

نظریه گراف در قرن بیستم شاهد پیشرفت بی‌سابقه‌ای بوده است. در سال‌های اخیر کاربرد نظریه گراف در بررسی ساختار مواد و خواص آنها به شکل گسترده‌ای افزایش یافته است. شیمیدانان از تعدادی کمیت‌های وابسته به گراف یک مولکول برای تخمین زدن بعضی از خواص فیزیکی و شیمیایی آن مولکول استفاده می‌کنند. این کمیت‌ها اندیس‌های توپولوژیک نامیده می شوند. اندیس توپولوژیک عددی است که مشخص کننده یک یا چند خاصیت شیمیایی یا فیزیکی مولکول است و تحت یکریختی گراف‌ها پایاست.

اندیس وینر در سال ۱۹۴۷ توسط شیمیدانی به نام هارولد وینر برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی و شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شد. اندیس وارون معکوس وینر نیز یکی دیگر از اندیس‌های توپولوژیک است که در سال ۲۰۰۲ معرفی شد.

در فصل اول این پایان نامه به تعاریف و مقدماتی از نظریه گراف اشاره می‌کنیم، سپس تعدادی از اندیس‌های توپولوژیکی را معرفی می‌کنیم در این فصل از مراجع [۱۰] و [۱۱] استفاده شده است. در فصل دوم تعدادی کران برای اندیس وارون معکوس وینر معرفی می‌کنیم. مرجع اصلی این فصل مرجع [۹] است.

یک شبکه TUC_4C_8 یک آرایش سه ظرفیتی است که به صورت تناوبی به وسیله مربع و هشت ضلعی و یا به وسیله لوزی و هشت ضلعی ساخته می‌شود. هرگاه این آرایش سه ظرفیتی به وسیله مربع و هشت ضلعی ساخته

شود، آن را با $TUC_4C_8(S)$ و هرگاه به وسیله لوزی و هشت ضلعی ساخته شود، آن را $TUC_4C_8(R)$ نشان می دهند. این آرایش سه ظرفیتی می‌تواند یک استوانه یا یک چنبره بوجود آورد.

در فصل سوم اندیس وارون معکوس وینر نانولوله و نانوچنبره $TUC_4C_8(S)$ و $TUC_4C_8(R)$ را با استفاده از نرم-افزار *Maple* محاسبه می‌کنیم.

در فصل چهارم نیز در ابتدا تعدادی کران برای ماکزیمم مقدار ویژه ماتریس وارون معکوس وینر ارائه می‌کنیم سپس تعدادی از کران‌هایی را که در فصل ۲ آورده شده بود بهبود می‌بخشیم.

فصل اول

تعاریف و مفاهیم اولیه

۱-۱ آشنایی با برخی از مفاهیم و تعاریف مورد نیاز

تعریف ۱-۱-۱ گراف G عبارت است از دو تایی مرتب $(V(G),E(G))$ که در آن $V(G)$ مجموعه‌ی غیر تهی است، که به آن مجموعه رأس‌ها و $E(G)$ مجموعه‌ای شامل زیر مجموعه‌های دو عضوی از مجموعه رأس-هاست که به آن مجموعه یال‌ها می‌گویند. گراف G را با $G=(V(G),E(G))$ نشان می‌دهند.

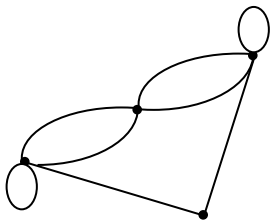
تعریف ۱-۱-۲ دو رأس u,v از گراف $G=(V(G),E(G))$ را مجاور گویند هرگاه $\{u,v\}\in E(G)$ باشد. برای سادگی یال $\{u,v\}$ را با uv نشان داده و u و v رأس‌های انتهایی یال uv می‌گویند.

مجموعه رأس‌های مجاور با رأس v را با $\Gamma(v)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۱-۱-۳ تعداد رأس‌های یک گراف را مرتبه آن گراف و تعداد یال‌های آن را اندازه آن گراف گویند.

گرافی که تعداد رأس‌ها و یال‌هایش متناهی است را گراف متناهی و در غیر این صورت نامتناهی گویند.

تعریف ۱-۱-۴ در هر گراف، یالی را که رأس‌های انتهایی آن یکسان باشد، طوقه و مجموعه‌ای متشکل از حداقل دو یال که پایان‌های یکسان داشته باشند را یال‌های چندگانه گویند. در شکل ۱-۱-۱ گرافی با طوقه و یال‌های چندگانه آورده شده است.



شکل ۱-۱-۱ گرافی برای آشنایی با طوقه و یال‌های چندگانه

گراف G را گراف ساده گویند هرگاه طوقه و یال‌های چندگانه نداشته باشد. در این پایان نامه تمام گراف‌ها ساده و متناهی هستند.

تعریف ۱-۱-۵ تعداد یال‌هایی که از رأس v در گراف G می‌گذرد را درجه رأس v نامیده و با $\deg(v)$ نمایش می‌دهند. درگراف G، هر رأس از درجه یک را یک رأس آویخته G گویند.

گراف G را r-منتظم گویند هرگاه عدد صحیح غیر منفی r وجود داشته باشد به طوریکه

$$\forall v \in V(G) \qquad \deg(v) = r$$

گراف صفر منتظم را گراف پوچ گویند.

تعریف ۱-۱-۶ دو گراف $G = (V(G), E(G))$ و $H = (V(H), E(H))$ را مساوی گویند هرگاه $V(G) = V(H)$ و $E(G) = E(H)$.

تعریف ۱-۱-۷ دو گراف $G=(V(G),E(G))$ و $H=(V(H),E(H))$ را یکریخت گویند و با $G\cong H$ نشان می‌دهند هر گاه تابع یک به یک و پوشایی مانند $\varphi:V(G)\to V(H)$ وجود داشته‌باشد به طوریکه

$$uv\in E(G)\Leftrightarrow \varphi(u)\varphi(v)\in E(H)$$

تعریف ۱-۱-۸ هرگاه $G=(V(G),E(G))$ یک گراف ساده باشد گراف مکمل G را با $\bar{G}$ نشان داده می‌شود و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\bar{G}=(V(G),\bar{E}(G)) \quad \text{و} \quad \forall u,v\in V(G)\ \ uv\in E(G)\Leftrightarrow uv\notin \bar{E}(G)$$

گراف ساده G را خود مکمل گویند هر گاه $G\cong\bar{G}$.

تعریف ۱-۱-۹ گراف $H=(V(H),E(H))$ را زیر گراف $G=(V(G),E(G))$ گویند هرگاه:

$$V(H)\subseteq V(G)\ \ ,E(H)\subseteq E(G)$$

گراف H را زیر گراف القایی گراف G روی مجموعه V_1 گویند هرگاه $V_1\subseteq V(G)$ ، $V(H)=V_1$ و هر یال G که دو انتهایش در V_1 باشد یک یال در H نیز باشد.

تعریف ۱-۱-۱۰ در گراف $G=(V(G),E(G))$ هرگاه $F\subseteq E(G)$، $G-F$ زیر گرافی از G است که در آن $V(G-F)=V(G)$ و $E(G-F)=E(G)-F$، اگر $F=\{e\}$ آنگاه $G-F$ را با $G-e$ نشان می دهند.

تعریف ۱-۱-۱۱ در گراف $G=(V(G),E(G))$ دنباله متناهی یک در میان از رئوس و یال‌های گراف G، به صورت $W: v_0e_1v_1e_2v_2...e_nv_n$ را یک گشت می‌نامند، هر گاه برای هر $i=1,2,...,n$ داشته باشیم $e_i=v_{i-1}v_i$. تعداد یال‌های هر گشت را طول آن گشت گویند. اگر $v_0=v_n$ گشت را بسته و در غیر این صورت آن را باز می-نامند.

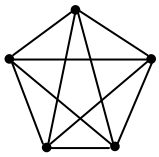
گشتی که رأس تکراری نداشته باشد را مسیر نامیده و مسیر به طول n را با P_{n+1} نشان می‌دهند.

گشت بسته با طول بزرگتر یا مساوی با ۳ را که رأس و یال تکراری نداشته باشد دور گویند. دور به طول n را با C_n نشان می دهند.

تعریف ۱-۱-۱۲ گراف G را همبند گویند هرگاه بین هر دو رأس دلخواه آن یک مسیر وجود داشته باشد، در غیر این صورت G را ناهمبند گویند.

درگراف همبند G طول کوتاهترین مسیر بین رأس‌های v و w را فاصله از v تا w گویند و با $d_G(v,w)$ نشان می‌دهند.

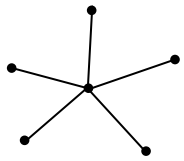
تعریف ۱-۱-۱۳ گراف ساده‌ای که هر دو رأس دلخواه متمایز آن مجاورند کامل گویند. گراف کامل از مرتبه n را با K_n نشان می‌دهند. در شکل ۱-۱-۲ گراف K_5 نشان داده شده است.



شکل ۱-۱-۲ K_5

تعریف ۱-۱-۱۴ گراف $G=(V(G),E(G))$ را دو بخشی با بخش‌های V_1 و V_2 گویند و آن را با $G(V_1,V_2)$ نمایش می‌دهند هرگاه مجموعه رأس‌های G را بتوان به دو مجموعه ناتهی V_1 و V_2 به گونه‌ای افراز کرد که هر یال G یک انتهایش در V_1 و انتهای دیگرش در V_2 باشد.

گراف ساده دو بخشی $G(V_1,V_2)$ را کامل گویند هرگاه هر رأس در V_1 با تمام رأس‌های V_2 مجاور باشد. گراف کامل $G(V_1,V_2)$ با $|V_1|=p$ و $|V_2|=q$ را با $K_{p,q}$ نشان می‌دهند. گراف دو بخشی $K_{1,q}$ را ستاره گویند و گراف ستاره مرتبه n را با S_n نشان می‌دهند. در شکل ۱-۱-۳ گراف S_6 نشان داده شده است.



شکل ۱-۱-۳ S_5

تعریف ۱-۱-۱۵ یک شاخه در رأس v از درخت T، یک زیردرخت ماکزیمال شامل رأس v است که v یک رأس پایانی آن باشد. ماکزیمال بودن نسبت به رابطه زیر درخت بودن است.

تعریف ۱-۱-۱۶ گراف همبند بدون دور را درخت گویند.

تعریف ۱-۱-۱۷ در گراف همبند G خروج از مرکز رأس $v \in V(G)$ را با $e(v)$ نشان می‌دهند و به صورت $e(v) = \max\{d(u,v) : u \in V(G)\}$ تعریف می‌کنند.

شعاع گراف همبند G را با $rad(G)$ نشان می‌دهند و عبارت است از:

$$rad(G) = \min\{e(v) : v \in V(G)\}$$

قطرگراف همبند G را با $diam(G)$ نشان می‌دهند و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathrm{diam}(G) = \max\{d(u,v) : u,v \in V(G)\}$$

مرکز گراف همبند G، $C(G)$ زیر گراف القا شده روی تمامی رئوسی مانند w است که خروج از مرکز آنها برابر با $rad(G)$ است.

تعریف ۱-۱-۱۸ بسیاری از مولکول‌ها و ترکیب‌های شیمیایی را می توان به صورت یک گراف در نظر گرفت به این صورت که هر رأس نشانگر یک اتم از مولکول و پیوند کوالانسی بین اتم ها متناظر با یال‌های گراف هستند. گراف بدست آمده از ترکیبات شیمیایی گراف مولکولی نامیده می‌شود. در هیدروکربن‌ها که فقط از اتم‌های کربن

وهیدروژن تشکیل شده اند، اتم‌های کربن را به عنوان رئوس گراف مولکولی در نظر گرفته و از اتم‌های هیدروژن صرف نظر می شود، زیرا هنگامی که اتم‌های کربن شناخته شوند، مولکول شناخته می شود. زیرا در این صورت اتم‌های هیدروژن به گونه‌ای اضافه می شوند که درجه رئوس اتم‌های کربن را به چهار برسانند بنابراین می‌توان اتم‌های هیدروژن را نادیده گرفت.

۱-۲ اندیس های توپولوژیکی و اهمیت آن

در سال‌های اخیر استفاده از مفاهیم ریاضی در بررسی ترکیبات شیمیایی به منظور تعیین خواص آنها به شکل گسترده‌ای افزایش یافته است. این مفاهیم بیشتر به منظور مطالعه گراف‌های مولکولی به کار گرفته می‌شود. یکی از مباحث مطرح در این زمینه اندیس توپولوژیک یک گراف است. اندیس توپولوژیک عددی بر حسب پارامترهای گراف (درجه رئوس، فواصل رئوس و ...) است که مشخص کننده یک یا چند خاصیت شیمیایی یا فیزیکی آن مولکول است و تحت یکریختی گراف‌ها پایاست.

اولین اندیس توپولوژیک در سال ۱۹۴۷ توسط شیمیدانی به نام هارولد وینر[۱] برای تشریح روابط بین خواص فیزیکی- شیمیایی ترکیبات آلی مطرح شد. او توانست رابطه‌ای خطی بین این اندیس و نقطه جوش این آلکان‌ها بدست آورد. اما تعریف دقیق این اندیس بر مبنای مفاهیم نظریه گراف در سال ۱۹۷۱ توسط هوسویا[۲] برای گراف‌های دلخواه معرفی شد.

اندیس‌های دیگری نیز بعدها برای مطالعه خاصیتهای شیمیایی و فیزیکی مواد معرفی شدند که امروزه در علوم مختلف مانند شیمی، فیزیک، زیست شناسی، و داروسازی کاربرد آنها دیده می شود. از ساختارهایی که در این زمینه مورد بررسی قرار گرفتند نانو لوله‌ها[۳] هستند.

---

۱ Harold Wiener

۲ Hosoya

۳ nanotubes