دانشکده علوم ریاضی

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد ریاضی (محض)

اندیس وینر-یالی حاصلضرب ریشه‌ای گراف‌ها و بعضی از فولرن‌ها

نگارنده

اسماعیل بابائی خضرلو

استاد راهنما

پروفسور علی ایرانمنش

بهمن ماه ۱۳۸۸

سپاسگذاری

ستایش خداوندی را که اول است بی آنکه پیش از او اولی باشد و آخر است بی آنکه پس از وی آخری باشد.

پروردگار خویش را منانم به خاطر لطف بی شائبه‌اش که مرا در به انجام رساندن این کار یاری نمود.

سپاس بی‌کران خود را به خانواده‌ام که مشوق اصلی من در زندگی و تحصیلم بودند و هستند، به استاد گرانقدرم دکتر ایرانمنش، برای حمایت‌های صمیمانه‌شان و به دوستان عزیز آقای علیزاده و ونائی که مرا در این کار یاری نمودند تقدیم می‌دارم.

اسماعیل بابائی خضرلو

بهمن ۱۳۸۸

چکیده:

اندیس توپولوژیکی یک گراف عددی است که نسبت به یکریختی گراف‌ها پایا است و به منظور مطالعه گراف‌های مولکولی در شیمی معرفی شده است. قدیمیترین اندیس توپولوژیکی، اندیس وینر است که توسط هارولد وینر بصورت مجموع فاصله‌های بین راس‌های گراف تعریف شد.
در این پایان نامه بر اساس تعریف اندیس وینر-یالی، یک کران بالا برای گراف همبند از مرتبه n تعیین می‌شود. در ادامه اندیس وینر-یالی حاصلضرب ریشه‌ای گراف‌ها، درخت‌های بت تعمیم‌یافته و دندریمر، فولرن C_{80} و نانو ستاره نوع اول محاسبه می‌شود.

واژگان کلیدی: اندیس توپولوژیکی؛ اندیس وینر-یالی؛ حاصلضرب ریشه‌ای گراف‌ها؛ درخت بت تعمیم‌یافته؛ درخت دندریمر؛ فولرن؛ نانو ستاره

فهرست مطالب

پیشگفتار.....۱

فصل اول: پیش نیازها.....۲

۱-۱- پیشینه تاریخی :.....۲

فناوری نانو.....۳

آشنایی با فولرن ها و خاصیتهای آن ها.....۳

آشنایی با دندریمرها و نانوستارهها و خاصیتهای آنها.....۷

۱-۲- تعریفها و مفهومهای اولیه.....۸

۱-۳- اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت آنها.....۱۵

تعریف اندیس توپولوژیکی.....۱۵

اهمیت اندیسهای توپولوژیکی.....۱۵

معرفی برخی از اندیسهای توپولوژیکی.....۱۶

فصل دوم: معرفی اندیس وینر- یالی و تعین کران بالا.....۱۸

۲-۱- معرفی اندیس وینر-یالی.....۱۸

۲-۲-تعیین یک کران بالا برای اندیس وینر-یالی نوع اول.....۲۷

فصل سوم : اندیس وینر-یالی حاصلضرب ریشهای گرافها و برخی دندریمرها.....۳۷

۳-۱- اندیس وینر-یالی حاصلضرب ریشهای گرافها.....۳۷

۳-۲- اندیس وینر-یالی درخت بت تعمیم یافته و درخت دندریمر.....۴۳

فصل چهارم: محاسبه اندیس وینر-یالی نوع اول و دوم فلورن C_{80} و نانو ستاره نوع اول.....۵۱

۴-۱- محاسبه اندیس وینر-یالی نوع اول و دوم فلورن C_{80} ۵۱

۴-۲- محاسبه اندیس وینر-یالی نوع اول و دوم نانو ستاره نوع اول.....۵۵

مراجع..... ۷۵

پیش‌گفتار

اندیس‌های توپولوژیکی عموما بر مبنای مفهوم فاصله در گراف تعریف می‌شوند. قدیمی‌ترین اندیس توپولوژیکی در سال ۱۹۴۷ توسط یک شیمیدان به نام هارولد وینر[۱] برای تعیین خاصیت‌های نوعی از آلکان‌ها تعریف شد [24]. او توانست یک رابطه خطی بین این اندیس و نقطه جوش آلکان‌ها بدست آورد، تعریف دقیق این اندیس برای یک گراف دلخواه بر مبنای نظریه گراف در سال ۱۹۷۱ توسط هوسویا[۲] معرفی شد. محققان زیادی از جمله گاتمن[۳] این راه را ادامه دادند، وی رابطه اندیس وینر را با خاصیت‌های شیمیایی–فیزیکی مواد غیرقطبی مورد بررسی قرار داد[15-12]. مقاله‌های زیادی در مورد اندیس وینر وکاربردهای آن‌ها منتشر شده است[8-6]. اندیس‌های دیگری نیز بعدها برای مطالعه‌ی خاصیت‌های شیمیایی و فیزیکی مواد معرفی شدند که امروزه در علوم مختلف مانند شیمی، فیزیک، زیست شناسی و داروسازی کاربرد آنها دیده می شود مانند اندیس سگد [20]، اندیس PI [21,22]، اندیس شولتز [22].

در فصل اول این پایان‌نامه پیشنه تاریخی در ارتباط با پیدایش علم نانو و برخی از گراف‌های مولکولی مانند فولرن و نانو ستاره و مفاهیم اولیه نظریه گراف آورده می‌شود. در فصل دوم، اندیس وینر-یالی معرفی و یک کران بالا برای گراف همبند از مرتبه n تعیین می‌شود. مرجع‌های اصلی این فصل [5,18] می‌باشند. در فصل سوم حاصلضرب ریشه‌ای گراف‌ها که نخستین بار توسط گودسیل[۴] و مکی[۵] در سال ۱۹۷۸ معرفی شدند [17] مطالعه و اندیس وینر-یالی آن به‌دست می-آید و با استفاده از این مفهوم، اندیس وینر-یالی درخت‌های بت تعمیم یافته و دندریمر محاسبه می‌شود. در فصل چهارم، اندیس وینر-یالی دو نوع گراف مولکولی، فولرن $\boldsymbol{C_{80}}$ و نانو ستاره نوع اول توسط نرم افزار GAP و Maple محاسبه می‌شود. مطلب‌های فصل سوم و چهارم کارهای جدیدی می‌باشد که توسط نگارنده انجام شده است.

[۱] Harold Wiener

[۲] Hosoya

[۳] Gutman

[۴] Godsil

[۵] Mckay

فصل اول: پیش نیازها

۱-۱- پیشینه تاریخی :

در سالهای اخیر استفاده از مفهوم‌های ریاضی در برخی عنصرهای شیمیایی برای تعیین خاصیت-های آنها به شکل گسترده‌ای افزایش یافته است. این مفهوم‌ها بیشتر به منظور مطالعه‌ی شبکه‌ی منتسب به یک مولکول به کار گرفته می‌شوند. شبکه مولکولی در واقع یک گراف است که راس‌های آن اتم‌ها و پیوندهای موجود، یال‌های آن می‌باشند. در سال‌های اخیر مطالعه شبکه‌های مولکولی با استفاده از مباحث نظریه گراف گسترش چشمگیری داشته و از جمله‌ی مباحث مطرح در این زمینه، اندیس‌های توپولوژیکی گراف ها هستند که به عنوان توصیف گرهای ساختاری معرفی می-شوند.

اندیس توپولوژیکی یک گراف عددی است که نسبت به یکریختی گراف‌ها پایا و مبین ویژگی خاصی از آن گراف می‌باشد. از مزیت‌های این توصیف‌گر نسبت به توصیف‌گرهای هندسی و کوانتمی این است که محاسبه‌ی آن برای شبکه‌های با ساختار مختلف بسیار ساده‌تر می‌باشد. اندیس‌های توپولوژیکی عموما بر مبنای مفهوم فاصله در گراف تعریف می‌شوند. قدیمی‌ترین اندیس توپولوژیکی در سال ۱۹۴۷ توسط یک شیمیدان به نام هارولد وینر برای تعیین خاصیت‌های نوعی از آلکان‌ها تعریف شد. او توانست یک رابطه خطی بین این اندیس و نقطه جوش آلکان ها بدست آورد اما تعریف دقیق این اندیس برای یک گراف دلخواه بر مبنای نظریه گراف در سال ۱۹۷۱ توسط هوسویا معرفی شد. اندیس‌های دیگری نیز بعدها برای مطالعه‌ی خاصیت‌های شیمیایی و

فیزیکی مواد معرفی شدند که امروزه در علوم مختلف مانند شیمی، فیزیک، زیست شناسی و داروسازی کاربرد آنها دیده می شود.

فناوری نانو

فناوری نانو واژه ایست کلی که به تمام فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود. این واژه اولین بار توسط نوربواتانیگچی[۶] استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ برای توصیف ساخت مواد دقیقی که تلورانس ابعادی آنها در حد نانو متر می باشد، مطرح شد. در سال ۱۹۸۶ کی اریک‌درکسلر[۷] در کتابی با عنوان "موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری نانو" تعریفی مجدد از فناوری نانو آورد و آن را در کتاب " نانو سیستم ها ماشین های مولکولی چگونگی ساخت و محاسبات آنها " توسعه داد.

آشنایی با فولرن ها و خاصیت‌های آن ها

ساختار فولرن‌ها

کربن در طبیعت دارای پنج آلوتروپ الماس، گرافیت، نانولوله، کربن بی شکل و فولرن است، که همگی جامد می‌باشند. در الماس که از سخت‌ترین اجسام طبیعی است، هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند دارد و هیبریداسیون اتم‌های کربن در این ساختار، به شکل sp3 می‌باشد. در گرافیت شش ضلعی‌های منتظم کربنی لایه‌هایی را ایجاد کرده‌اند که بر روی یکدیگر انباشته شده و هر لایه از طریق پیوندهای ضعیف واندروالس به لایه زیرین متصل است. هنگامی که لایه های گرافیتی در هم پیچیده شوند، نانولوله‌های کربنی را تشکیل می‌دهند. در واقع نانولوله، گرافیتی

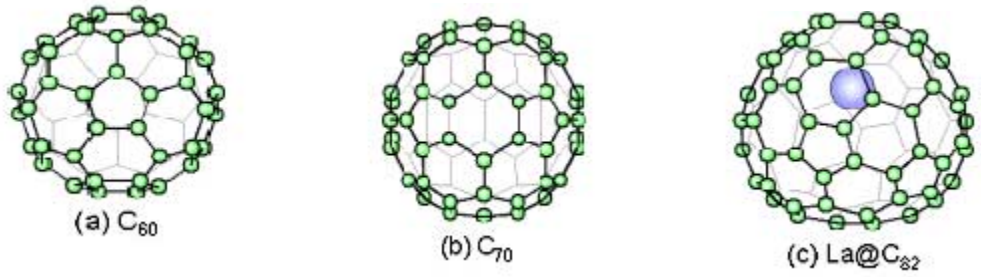
[۶] Norio Taniguchi

[۷] Kei erik drexler

است که به شکل لوله در آمده باشد. فولرن، نخستین مولکول کربن کروی شناخته شده با کربن-های مرتب شده، در قالب کره‌ای به شکل توپ فوتبال می‌باشد.

پایه‌ی فولرن‌ها صفحه‌های موجود درگرافیت می‌باشد با این تفاوت که در ساختار اتمی فولرن‌ها به جای شش‌ضلعی‌های منتظم موجود در صفحه‌های گرافیت، یک سری شش‌ضلعی و پنج‌ضلعی منتظم وجود دارد که به صورت یک در میان در کنار هم قرار می‌گیرند و کره فولرن را تشکیل می‌دهند. قرارگرفتن این پنج‌ضلعی‌ها و شش‌ضلعی‌ها در کنار هم برای شکل دادن یک ساختار کروی ضروری است. در حقیقت بدون حضور پنج‌ضلعی‌ها در ساختار گرافیت نمی‌توان از صفحه‌های گرافیت ساختارهای کروی به دست آورد.

فولرن‌ها را با توجه به تعداد اتم‌های موجود در ساختمانشان شناسایی می‌کنند. برای نامگذاری فولرن‌ها از یک حرف C استفاده می‌شود که بیانگر اتم کربن موجود در ساختار آن هاست. بعد از حرف C تعداد اتم‌های کربن موجود در واحد شبکه‌ی کروی فولرن ذکر می‌شود. مثلاً مولکول C_{60} دارای ۶۰ اتم کربن است. نمونه‌هایی از فلورن‌ها در شکل ۱-۱ نشان داده شده است.



شکل۱-۱ انواعی از فولرن ها

کشف فولرن‌ها

در سال ۱۹۶۶ دانشمندی به نام دالس برای اولین بار در مورد توانایی تولید ساختارهای کروی بسته‌ای از اتم‌های کربن بحث نمود. در ابتدا این پیشنهاد مورد توجه دانشمندان وقت قرار نگرفت. چهار سال بعد در سال ۱۹۷۰ دانشمندی به نام اوساوا در تحقیقاتش راجع به ساختارهای کربنی موجود در طبیعت، یک مولکول کربنی C_{60} را با ساختاری شبیه توپ فوتبال متصور شد. کشف اصلی فولرن در سال ۱۹۸۵ رخ داد. در این سال سه دانشمند به نام‌های کروتو، اسمالی و کارل بر روی فرایندی برای تولید کلاسترهای کربنی ستاره‌ای شکل مطالعه می‌کردند. این روش به وسیله متمرکز کردن لیزر روی یک گرافیت انجام شد. بعد از انجام این آزمایش‌ها و طی انجام یک سری آزمایش‌های طیف سنجی روی محصولات تولید شده، مولکول‌های C_{60} در مواد تولید شده کشف شدند. این مولکول به علت شباهتی که با ساختار توصیف شده توسط معمار معروف، باک مینسترفولر داشت، به این اسم نامیده شد. دانشمندان مذکور به خاطر این کشف در سال ۱۹۹۶ جایزه نوبل سال را دریافت نمودند.

خاصیت‌ها و کاربردهای فولرن‌ها

شکل زیبا و بی سابقه‌ی فولرن‌ها و خاصیت‌های شگفت‌انگیز این مولکول‌ها توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده است. پایدارترین و فراوان‌ترین فولرن‌ها انواع C_{60} و C_{70} هستند. بنابراین بیشتر خاصیت‌های ذکر شده در مورد فولرن‌ها نیز روی این دو نوع متمرکز شده است. در ادامه به چند نمونه از خاصیت‌های فلورن‌ها اشاره می‌کنیم.

۱. **استحکام مکانیکی؛ به عنوان تقویت کننده در نانوکامپوزیت‌ها**

فولرن‌ها از نظر مکانیکی مولکول‌های بیش از حد قوی هستند و تحمل فشارهای بسیار زیاد را دارند به طوری که پس از تحمل فشاری حدود ۳۰۰۰ اتمسفر به شکل اولیه‌ی خود (ساختار کروی فولرن) برمی‌گردند. اخیراً از این خاصیت در تولید نانوکامپوزیت‌ها استفاده شده است به این ترتیب که فولرن‌ها را به عنوان ماده پرکننده وارد ماده زمینه کرده و به این ترتیب تنش تسلیم کامپوزیت‌ها را بهبود می‌بخشند.

۲. خاصیت روان‌سازی بالا؛ روان‌کاری در مقیاس نانومتری

مولکول‌های فولرن به وسیله پیوندهای ضعیفی که ناشی از نیروهای واندروالس بین آن هاست به هم می‌چسبند. این نیروهای نگهدارنده مشابه نیروهای موجود بین لایه‌های گرافیت است. بنابراین برخی از خاصیت‌های فولرن‌ها مشابه گرافیت می‌باشد. به عنوان مثال اخیراً از فولرن‌ها به جای گرافیت در کاربردهای روان‌کاری در مقیاس نانومتری استفاده می‌شود.

۳. حساس در برابر نور؛ کاربردهای فوتونیک

فولرن‌ها در برابر نور بسیار حساس بوده و با تغییر طول موج نور خاصیت‌های الکتریکی این مواد به شدت تغییر می‌کند. بنابراین کاربردهای فوتونیک زیادی برای این مواد در آینده پیش‌بینی می‌شود.

۴. ساختار توخالی؛ مکانی برای قرارگیری عنصرها

می‌توان درون مولکول‌های توخالی فولرن‌ها را توسط عنصرهای دیگر پر کرد. به عنوان مثال با قرار دادن برخی عنصرهای فلزی درون فولرن‌ها خاصیت‌های الکتریکی آنها بهبود می‌یابد. از چنین ساختارهایی در تولید دستگاه‌های تصویربرداری تشدید مغناطیسی (MRI) در پزشکی استفاده می‌شود.

۵. خاصیت‌های زیست‌سازگاری؛ دارورسانی

درون فولرن‌ها می‌توان برخی آنزیم‌ها و یا داروها و هورمون‌های مورد نیاز بدن را قرار داد. به این ترتیب در نانو پزشکی می‌توان از این مواد استفاده نمود. در یکی از جدیدترین کاربرد فولرن‌ها برای مبارزه با ویروس ایدز، آنزیم ضد این ویروس را درون فولرن‌ها قرار دادند و آن را وارد بدن نمودند. مداوای بیماری ایدز با چنین روشی امیدوار کننده بوده است. علاوه بر این کشف شده است که احتمالاً فولرن‌ها برهم‌کنش‌های بیولوژیکی با ویروس HIV دارند و می‌توانند در مبارزه با این ویروس به آنزیم‌های دیگر کمک کنند.

آشنایی با دندریمرها و نانوستاره‌ها و خاصیت‌های آن‌ها

دندریمرها مولکول‌های بزرگ با ساختاری منظم هستند. از نقطه نظر شیمی پلیمری، دندریمرها، ماکرو مولکول‌های مونو دی اسپر (در اندازه و شکل های یک دست) با یک ساختار منظم و چند شاخه‌ای در بعد ۳ هستند. این مولکول‌ها از سه قسمت مهم تشکیل شده‌اند: هسته، شاخه‌ها و گروه‌های پایانی.

ایجاد دندریمرها با استفاده از واکنش‌های شیمیایی طراحی شده ویژه، یکی از بهترین مثال-ها از فرایند کنترل شده تکراری می‌باشد. هر لایه جدید یک تولید جدید به راه می‌اندازد و با دو برابر کردن تعداد مکان‌های واکنش تقریبا وزن مولکول نسبت به قبل دو برابر می‌شود. از اهمیت این مولکول‌ها می‌توان به کنترل دقیق واکنش‌پذیری آن‌ها اشاره کرد.

نانوستاره‌های دندریمر نمونه‌ای از مولکول‌های دندریمر هستند. نانوستاره‌ها به دلیل سطح تیز و گوشه‌دار خود به این نام مشهورند. این ذرات از نمونه‌هایی هستند که توجه به آنها در حال افزایش است و به طور فزاینده‌ای توسط کارشناسان در آزمایشگاه‌های نانوفوتونیک (LANP) و سایر آزمایشگاه‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرند. یکی از تحقیق‌های نوری جدید در آزمایشگاه دانشگاه

ریس نشان می‌دهد ذرات ریز طلا موسوم به نانوستاره‌ها می‌توانند مانند حسگرهای بسیار قوی عمل کنند.

نانوفوتونیک یکی از زمینه‌های مطالعاتی است که به سرعت در حال رشد است که به بررسی روش‌های تولید و دستکاری‌های نوری با استفاده از ساختارهای طراحی شده بسیار کوچک می-پردازد. نانوستاره‌ها دارای برخی از بهترین خاصیت‌های ذرات فوتونیک مانند نانو میله‌ها هستند. این مولکول‌ها طیف‌هایی قوی ایجاد می‌کنند که به آسانی با آشکارسازهای نسبتا ارزان قابل شناسایی هستند. تحقیق‌ها نشان می‌دهد هر زایده روی نانوستاره‌ها، اثر طیفی و یا امضای مخصوصی دارد که می‌تواند برای تشخیص جهت‌گیری سه بعدی یک نانوستاره استفاده شود و احتمال‌های جدید برای حسگرهای مولکولی سه بعدی به وجود آورد. حساسیت زیاد آنها نسبت به یک محیط دی الکتریک موضعی، یک کیفیت و مزیت بسیار جالب برای حسگرهای مولکولی است.

۱-۲- تعریف‌ها و مفهوم‌های اولیه

۱-۲-۱. تعریف

یک گراف عبارتست از یک مجموعه‌ی ناتهی V و یک مجموعه (احتمالا تهی) E که شامل زیرمجموعه‌های دو عضوی مجموعه‌ی V باشد. عضوهای مجموعه‌ی V راس و عضوهای مجموعه‌ی E یال گراف نامیده می شوند. یک گراف را به صورت $G = (V, E)$ یا به صورت خلاصه با G نشان می‌دهیم.

۱-۲-۲. تعریف

مقصود از یال $e = \{u, v\}$ در گراف G اتصال دو راس u, v از این گراف می‌باشد و به صورت ساده $e = uv$ نوشته می‌شود در این حالت گوئیم راس‌های u, v مجاورند. تعداد راس‌های گراف را مرتبه

گراف و تعداد یال‌های آن را اندازه گراف نامند. همچنین دو یال e_1 وe_2 از گراف G را مجاور گویند اگر یک راس مشترک داشته باشند.

۱-۲-۳. تعریف

اگر در گراف G به ازای هر یال $e = \{u, v\}$ مهم باشد که راس u به v وصل می‌شود یا برعکس، آن گراف جهت‌دار نامیده می‌شود در غیر این صورت گراف G غیرجهت دار نامیده می شود.

۱-۲-۴. تعریف

مقصود از یک طوقه، یالی از گراف است که راس‌های ابتدا و انتها یکی باشد.

۱-۲-۵. تعریف

گرافی که دارای طوقه نباشد و بین هیچ دو راس آن بیش از یک یال وجود نداشته باشد، یک گراف ساده نامیده می‌شود.

۱-۲-۶. تعریف

در یک گراف تعداد راس‌هایی که با راس v مجاورند را درجه این راس می‌نامند و با $deg(v)$ نمایش می‌دهند.

۱-۲-۷. تعریف

فرض کنید G یک گراف و v یک راس G باشد، همسایگی $N(v)$ از v مجموعه راس‌های G است که با v مجاورند. همسایگی بسته $N(v) \cup \{v\}$ از v را با $N[v]$ نشان می‌دهیم.

۱-۲-۸. تعریف

گرافی که همه‌ی راس‌های آن دارای درجه برابر باشند گراف منتظم نامیده می‌شود. اگر درجه هر راس برابر k باشد آنرا k-منتظم نامند.

۱-۲-۹. تعریف

مقصود از یک مسیر در گراف G دنباله‌ای از راس‌ها به صورت $v_1, v_2, \ldots, v_k$ است که به ازای هر $1 \leq i \leq k$، $\{v_i, v_{i+1}\}$ یال‌های متمایز از گراف باشند. طول این مسیر را $k-1$ در نظر می‌گیریم. کوتاهترین مسیر بین دو راس از یک گراف مسیری است که دارای کمترین طول باشد. اگر مسیری بین دو راس نباشد آنگاه فاصله بین دو راس بی‌نهایت تعریف می‌شود. مسیری را که دارای راس‌های تکراری نباشد، ساده نامند. طول یک مسیر ساده تعداد یال‌های آن مسیر است.

به ازای هر دو راس u و v از گراف G، فاصله آن‌ها را با $d(u,v)$ نشان می‌دهیم. قطر گراف، طول بزرگترین مسیر در گراف G است که با $d(G)$ یا $diam(G)$ نشان می‌دهیم.

۱-۲-۱۰. تعریف

یک دور، یک مسیر ساده است که راس‌های ابتدا و انتهای آن یکی است.

۱-۲-۱۱. تعریف

گرافی را که بین هر دو راس آن حداقل یک مسیر وجود داشته باشد، یک گراف همبند نامند و در غیر اینصورت گراف را غیر همبند می‌نامند.

۱-۲-۱۲. تعریف

اگر u یک راس دلخواه گراف G باشد، دوری از مرکز u بیشترین فاصله بین u و سایر راس‌هاست که آن را با $e(u)$ نشان می‌دهیم. کمترین مقدار دوری از مرکز در بین تمام راس‌ها را شعاع گراف گویند. راس مرکزی گراف راسی است که دوری از مرکز آن برابر شعاع گراف باشد.

۱-۲-۱۳. تعریف

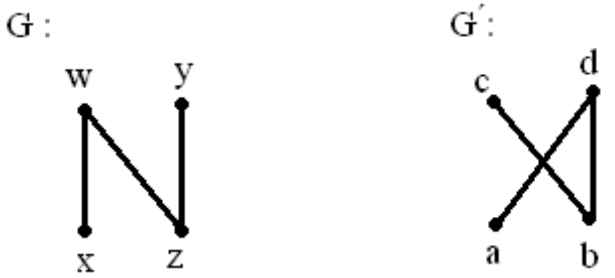
لایه i –ام فاصله‌ی راس u از گراف G، مجموعه‌ی راس‌هایی از گراف G است که فاصله آن‌ها از u برابر i می‌باشد.

۱-۲-۱۴. تعریف

یک زیرگراف از گراف G، گرافی است که همه راس‌ها و یال‌های آن به ترتیب متعلق به $V(G)$ و $E(G)$ است.

۱-۲-۱۵. تعریف

یک یکریختی از گراف ساده G به گراف ساده G' یک تناظر یک به یک چون $f:V(G)\to V(G')$ است بطوریکه $uv\in E(G)$ اگر و تنها اگر $f(u)f(v)\in E(G')$. برای مثال گراف‌های شکل ۱-۲ یکریختند.



شکل ۱-۲ گراف‌های یکریخت

تناظر دوسویی توسط نگاشت $f:V(G)\to V(\acute{G})$ چنین است

$$f(w)=a\,,f(x)=d\,,f(y)=b\,,f(z)=c$$

۱-۲-۱۶. تعریف

فرض کنید $G=(V,E)$ گرافی از مرتبه n باشد، ماتریس مجاورت گراف G که با نماد $A(G)$ نشان می دهیم ماتریسی $n\times n$ با درایه‌های A_{ij} است که درایه A_{ij} برابر یک است اگر دو راس i و j مجاور باشند و در غیر این صورت صفر است. بنابراین ماتریس مجاورت یک ماتریس متقارن می‌باشد.

۱-۲-۱۷. تعریف

گرافی را که تعداد راس‌ها و یال‌های آن متناهی باشد، گراف متناهی می‌نامند. همچنین اگر تعداد راس‌ها و یال‌ها هر دو نامتناهی باشد، گراف را نامتناهی گویند.

۱-۲-۱۸. تعریف

افراز یک گراف، لیستی از زیرگراف‌هاست که هر یال دقیقاً در یک زیرگراف ظاهر شود.

۱-۲-۱۹. تعریف

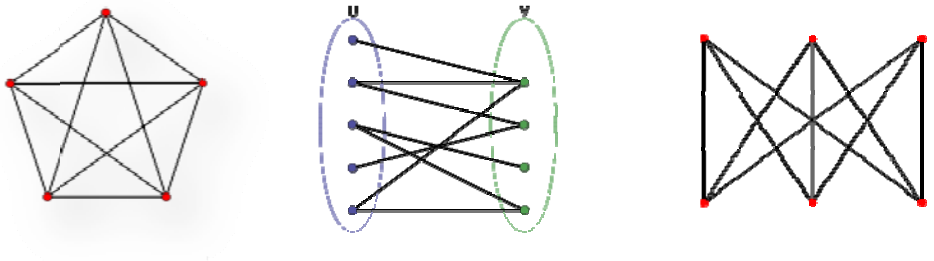
یک مسیر و یک دور به طول n را به ترتیب با P_n , C_n نشان می‌دهیم. یک گراف کامل، گراف یک ساده است که راس‌های آن دو به دو مجاورند. یک گراف کامل با n راس را با K_n نشان می‌دهیم.

۱-۲-۲۰. تعریف

یک درخت یک گراف همبند است که شامل دور نیست.

۱-۲-۲۱. تعریف

گراف G را دو بخشی نامند اگر بتوان مجموعه راس‌های آن را به دو مجموعه مجزای U و V چنان افراز نمود که هر یال دارای یک راس در مجموعه U و یک راس در مجموعه V باشد. گراف دو بخشی کامل، گرافی است که راس‌های U به تمام راس‌های V و راس‌های V به تمام راس‌های U وصل شود. اگر U دارای اندازه r و V دارای اندازه s باشد گراف را با $K_{r,s}$ نشان می‌دهیم. شکل ۱-۳ را ببینید.



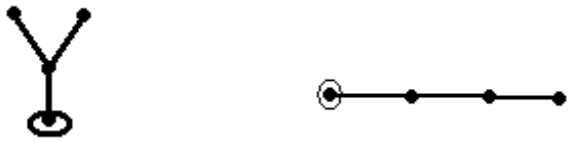
K_5 گراف دو بخشی $K_{3,3}$

شکل ۱-۳ نمونه ای از گراف های دو بخشی و کامل

در حالتی که V تنها دارای یک راس و U دارای $n-1$ راس باشد، یعنی گراف $K_{1,n-1}$، گراف دوبخشی کامل را یک ستاره n راسی می‌نامند و با S_n نشان می‌دهند. در حقیقت ستاره، درختی است که یک راس از آن با همه راس‌های دیگر مجاور است.

۱-۲-۲۲. تعریف

یک گراف را ریشه‌دار نامند هرگاه یک راس از آن با برچسبی ویژه از سایر راس‌ها متمایز شده باشد. این راس را ریشه گراف نامند (شکل ۱-۴).



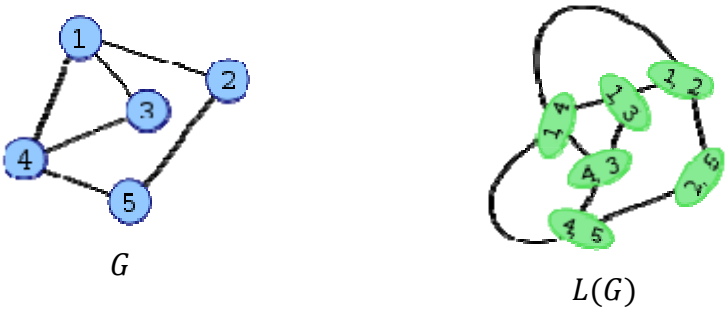
شکل ۱-۴ گراف ریشه دار

۱-۲-۲۳. تعریف

معروفترین گراف ریشه‌دار، درخت ریشه‌دار است. در درخت ریشه دار بیشترین فاصله از هر راس را سطح آن راس گویند. بالاترین سطح درخت را ارتفاع آن درخت نامند. اگر در درخت ریشه‌دار درجه همه راس‌ها برابر باشد آن را درخت دندریمر نامند. همچنین اگر در یک درخت ریشه‌دار درجه همه راس‌های هم سطح برابر باشد آن را درخت بِت تعمیم یافته گویند.

۱-۲-۲۴. تعریف

گراف خطی گراف G که با $L(G)$ نشان می‌دهیم گرافی است که هر یال گراف G، یک راس آن باشد. دو راس این گراف به هم متصل می‌شوند اگر یال‌های متناظر در گراف G مجاور باشند (شکل ۱-۵).



G $L(G)$

شکل ۱-۵ گراف خطی

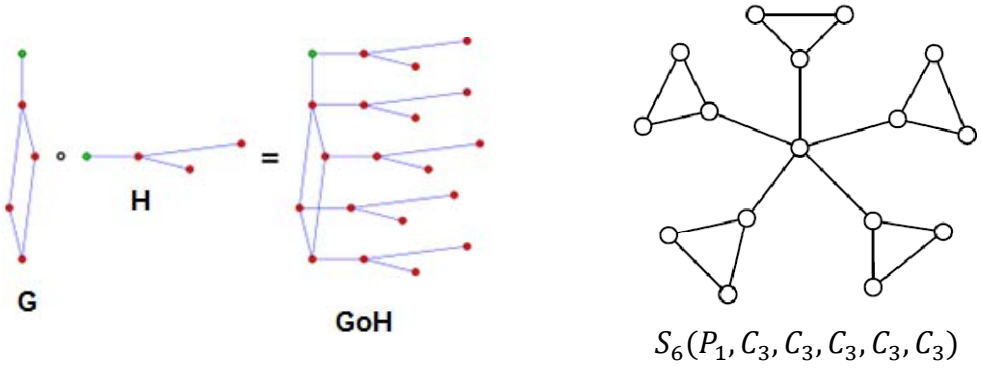
۱-۲-۲۵. قضیه

گراف G با گراف خطی خود یکریخت است اگر و تنها اگر G یک گراف دوری باشد.

۱-۲-۲۶. تعریف

اگر $G = \{G_1, \dots, G_n\}$ دنباله‌ای از گراف‌های ریشه‌دار و H یک گراف از مرتبه n باشد، گرافی را که از معادل فرض کردن راس i ام گراف H و ریشه گراف G_i بازای $i = 1,2, \dots, n$ حاصل می‌شود، حاصلضرب ریشه‌ای گراف H توسط دنباله G نامند و با $H(G)$ نشان می‌دهند.

حاصلضرب ریشه‌ای گراف G و گراف ریشه‌دار H که با GoH نشان می‌دهیم، چنین تعریف می‌شود: ریشه گراف H با راس‌های i ام گراف G ($i = 1,2, \dots, |V(G)|$) معادل فرض می‌شود به بیان دیگر $|V(G)|$ نسخه از H با راس‌های i ام گراف G معادل فرض می‌شود. برای درک بهتر تعریف‌های بالا به شکل ۱-۶ توجه کنید.



شکل ۱-۶ حاصلضرب ریشه ای گراف ها

۱-۳- اندیس‌های توپولوژیکی و اهمیت آن‌ها

تعریف اندیس توپولوژیکی

اندیس‌های توپولوژیکی اعدادی حقیقی نسبت داده شده به یک مولکول می‌باشند که برای مطالعه گرافهای مولکولی در شیمی معرفی شده‌اند و ساختارهای آن مولکول‌ها را مورد بررسی قرار می‌دهند. این اندیس‌ها بر حسب پارامترهای گراف (فاصله راس‌ها، فاصله یال‌ها و ...) تعریف می‌شوند و نسبت به یکریختی گراف‌ها پایا می‌باشند.

اهمیت اندیس‌های توپولوژیکی

با افزایش جرم مولکولی یک مولکول نقطه ذوب یا جوش آن نیز افزایش می‌یابد. حال اگر نمودار تغییرات جرم مولکولی بر حسب خاصیت‌های آن (مانند نقطه ذوب) رسم شود، این نمودار به هیچ وجه خطی نیست؛ لذا با داشتن یک خاصیت مولکول نمی‌توان ساختار آن را تعریف کرد. چنانچه اسکلت کربنی مولکول، یک گراف فرض شود و به آن یک نمایش ماتریسی (مانند ماتریس مجاورت) نسبت داده شود، با انجام یک سری محاسبات روی این ماتریس به عددی می‌رسیم که