دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده علوم ریاضی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد رشته ریاضی محض

محاسبه اندیس ابر وینر- یالی یک نانولوله

نگارنده

سیمین اسدی

استاد راهنما

پروفسور علی ایرانمنش

بهمن ۸۹

بسم الله الرحمن الرحيم

سپاس گزاری

سپاس خدایی را که هر چه دارم از اوست.

قبل ازهرچیز خدای منان را شاکرم که به من توانایی آموختن عطا فرمود تا بیاموزم وبعد از آن بر خود لازم میدانم از استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر ایرانمنش تشکر نمایم که مرا در انجام پایان نامه یاری رساندند. هم چنین از جناب آقای خرمالی به خاطر کمک های بی دریغشان در طول انجام پایان نامه قدر دانی می نمایم.

ودرپایان این پایان نامه را به پدر ومادر عزیزم که مشوق های اصلی من بودندوهمسرم که در سختیهای این پایان نامه یار ویاورم بود وبه فرزندم که انگیزه من برای انجام این پایان نامه بود، تقدیم می کنم.

چکیده:

اندیسهای توپولوژیکی اعدادی حقیقی نسبت داده شده به یک مولکول می‌باشند که با هدف مطالعه روی گرافهای مولکولی در شیمی معرفی شده‌اند و ساختارهای مولکول را مورد بررسی قرار می‌دهند. این اندیسها بر حسب پارامترهای گراف (فاصله رأسها، فاصله یالها و ...) تعریف می‌شوند. اولین و قدیمی‌ترین اندیس توپولوژیکی توسط هارولد وینر (۱۹۴۷) بر حسب فاصله بین رأسهای متمایز در یک گراف تعریف شد. این اندیس برای تعیین روابط بین ساختار نانولوله ها و خواص شیمی- فیزیکی آنها بسیار مفید می باشد. در این پایان‌نامه اندیس جدید وینر یالی واب‌ر وینر یالی تعریف و در ادامه مقدار این اندیس برای نانولوله $TUC_4C_8(S)$ محاسبه می‌شود.

واژگان کلیدی: اندیس توپولوژیکی، نانولوله، اندیس وینر- یالی نوع اول ، اندیس وینر- یالی نوع دوم، اندیس ابر وینر- یالی نوع اول، اندیس ابر وینر- یالی نوع دوم

فهرست مطالب

پیشگفتار..... ۱

فصل ۱- مقدمه..... ۳

۱-۱- مفاهیم و تعاریف..... ۴

۱-۲ فناوری نانو..... ۷

۱-۲-۱- نانولوله‌ها وکاربردآنها..... ۷

۱-۲-۲- خواص نانولوله‌ها ۸

۱-۳- اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت آنها..... ۹

۱-۳-۱- تعریف اندیس توپولوژیکی..... ۹

۱-۳-۲- اهمیت اندیسهای توپولوژیکی..... ۹

۱-۴- اندیس وینر(*Wiener Index*)..... ۱۰

۱-۴-۱- تعریف اندیس وینر..... ۱۰

۱-۴-۲- تاریخچه و اهمیت اندیس وینر..... ۱۰

۱-۴-۳- اندیسهای *PI* و *Szeged*..... ۱۱

۱-۴-۴-اندیس شولتز (*Schultz Index*..... ۱۲

فصل ۲- اندیس ابر وینر- یالی ۱۳

۲-۱- معرفی اندیس ابر وینر- یالی..... ۱۴

۲-۲- رابطه صریح میان اندیس های وینرراسی وویندر یالی..... ۲۱

۲-۳- معرفی نانو لوله $TUC_4C_8(R,S)$..... ۳۰

۲-۴- محاسبه اندیس وینر یالی نانو لوله $TUC_4C_8(S)$..... ۳۱

فصل ۳- معرفی اندیس ابر وینر یالی نوع اول و دوم نانولوله $TUC_4C_8(S)$..... ۳۸

۳-۱- محاسبه اندیس ابر وینر یالی نوع اول نانو لوله $TUC_4C_8(S)$..... ۳۹

۳-۲ - محاسبه اندیس ابر وینر یالی نوع دوم نانو لوله $TUC_4C_8(S)$.....۵۷

منابع.....۶۰

واژه نامه.....۶۲

پیشگفتار

فناوری نانو واژه ای است کلی که به تمام فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار، با مقیاس نانو- یک نانومتر یک میلیاردم متر است- اطلاق می‌شود. اولین جرقه‌های مربوط به این زمینه، نه با عنوان امروزی، در سال ۱۹۵۹ زده شد. در این سال ریچارد فین‌مان طی یک سخنرانی با عنوان " آن پایین فضای زیادی وجود دارد"، ایده فناوری نانو را مطرح ساخت. دستکاری مستقیم مولکول و اتم‌ها نظریه‌ای بود که او ارائه داد. در ادامه در سال ۱۹۷۴، نوریو تاینگوچی، استاد دانشگاه علوم توکیو، برای اولین بار واژه فناوری نانو را بر زبانها جاری ساخت. در ادامه در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط کی‌اریک درکسلر در کتابی تحت عنوان "موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری نانو" بازآفرینی و مجدداً تعریف شد. وی این واژه را به شکل عمیق‌تری در رساله دکترای خود مورد بررسی قرار داد و بعدها آن را در کتابی تحت عنوان "نانو سیستم‌ها، ماشین‌های مولکولی، چگونگی ساخت و محاسبات آنها" توسعه داد. بدین ترتیب این فناوری گسترده و دارای شاخه‌های متعددی گردید که یکی از آنها شاخه "نانوتکنولوژی محاسبه‌ای" است.

در بسیاری مواقع ابزار آزمایشگاهی موجود برای انجام برخی از آزمایشها در مقیاس نانومتر مناسب نیستند و یا اینکه انجام این آزمایشها بسیار گران تمام می‌شود. با در نظر گرفتن اسکلت کربنی یک مولکول به عنوان یک گراف، می‌توانیم از ریاضیات به عنوان یکی از ابزارهای مناسب برای رفع این مشکلات، کمک بگیریم؛ به این صورت که اعدادی را به این گراف نسبت می‌دهیم که تغییرات آن با تغییرات خواص و فعالیت مولکولها خطی می‌شود و یا از معادله‌ای مشخص پیروی می‌کند، این عدد همان اندیس توپولوژیکی می‌باشد [۲۷].

اولین و قدیمی‌ترین اندیس توپولوژیکی در سال ۱۹۴۷ توسط هارولد وینر برای تشریح روابط بین خواص شیمی- فیزیکی ترکیبات آلی مطرح شد [۲۸]. در واقع استفاده از اندیسهای توپولوژیکی در بیولوژی و شیمی برای اولین بار توسط وینر شروع شد و او این اندیس را برای تشخیص خواص

فیزیکی نوعی آلکانها به نام پارافین مورد استفاده قرار داد. محققان زیادی از جمله گاتمن این راه را ادامه دادند. او رابطه اندیس وینر را با خواص شیمی- فیزیکی مواد آلی غیر قطبی مورد

بررسی قرار داد [۱۳-۱۱]. بدین ترتیب تحقیقات متعددی در زمینه اندیس توپولوژیکی وینر انجام گرفت که مقالات منتشر شده در این زمینه، از جمله [۱۰-۱، ۱۵، ۲۳-۲۲، ۲۸]، گواهی بر صدق این مطلب هستند. در راستای هدف وینر اندیسهای دیگری نیز مطرح شدند که از بین آنها می‌توان به اندیسهای سِگد [۲۱]، PI [۲۳-۲۲] و شولتز [۲۵]، اشاره کرد.

در فصل اول این پایان نامه برخی تعاریف مربوط به گراف ها مطرح شده است، پس از آن تعریف علم نانو و کاربردهای بیان شده است. در فصل دوم تعریف اندیس ابر وینر یالی آورده شده است ودر پایان این فصل اندیس وینر یالی نانو لوله $TUC_4C_8(S)$ محاسبه می شود . منابع اصلی این فصل [۱۶] و [۱۷] می باشند و در فصل سوم نیز اندیس ابر وینر یالی نوع اول ودوم نانولوله $TUC_4C_8(S)$ را محاسبه می کنیم. مطالب فصل سوم این پایان نامه کارهای جدیدی هستند که توسط نگارنده انجام شده است.

فصل اول

مقدمه

۱-۱- تعاریف

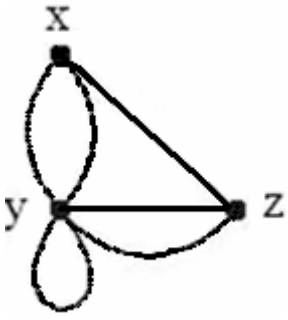
۱-۱-۱. تعریف

یک گراف از مجموعه‌ای غیر تهی از رأسها و مجموعه‌ای از یالها تشکیل شده است. گرافی مانند G با نماد $G=[V(G),E(G)]$ نمایش داده می‌شود که در آن $V(G)$ و $E(G)$ به ترتیب بیانگر تعداد رأسها و یالها می‌باشند. دو رأس متمایز از G مجاور نامیده می‌شوند، هرگاه نقاط انتهایی یک یال باشند. دو یال متمایز از G را مجاور می‌گویند، هرگاه حداقل یک رأس مشترک داشته باشند.

یک گراف روی صفحه، با قرار دادن هر رأس در یک نقطه و نمایش هر یال با اتصال نقاط انتهایشان، نشان داده می‌شود.

۱-۱-۲. تعریف

هر یال از یک رأس به خودش طوقه نامیده می‌شود؛ یالهای چندگانه یالهایی هستند که هر دو نقطه انتهایی آنها یکسان باشند. برای مثال یالهایی که در شکل ۱-۱ رأسهای x و y را به هم وصل می‌کنند، یالهای چندگانه می‌باشند و یال با ابتدا و انتهای y، در این رأس ایجاد طوقه می‌کند.



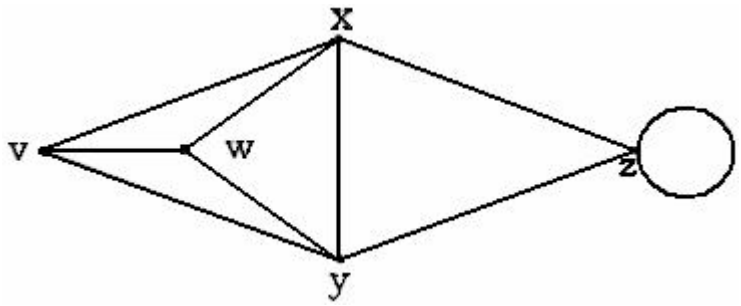
شکل ۱-۱.

۱-۱-۳. تعریف

گرافی که بدون طوقه و یالهای چند گانه باشد گراف ساده نامیده می‌شود.

۱-۱-۴. تعریف

گراف G را در نظر بگیرید. یک گشت در این گراف، دنباله‌ای متناهی از یالها به صورت $V_0 \to V_1 \to V_3 ... \to V_m$ است. یک گشت را گذر گویند هرگاه تمام یالهایش متمایز باشد. اگر رأسهای V_0، V_1، ...، V_m مجزا باشند، گذر را یک مسیر می‌نامند. اگر $V_0 = V_m$، مسیر را بسته گویند و مسیر بسته‌ای که حداقل یک یال داشته باشد، مدار می‌نامند. برای روشن شدن بحث شکل ۱-۲ را در نظر بگیرید:



شکل ۱-۲. گرافی برای آشنایی با تعریف مسیر

در شکل بالا $v \to w \to x \to y \to z \to z \to x$ یک گذر و $v \to w \to x \to y \to z$ یک مسیر است.

۱-۱-۵. تعریف

گراف G همبند نامیده می‌شود اگر و تنها اگر هر جفت از رأسهای G، متعلق به یک مسیر باشند؛ یعنی به ازای هر $u,v \in V(G)$، یک مسیر با نقطه ابتدایی u و نقطه انتهایی v وجود داشته باشد. در غیر این صورت G را ناهمبند گویند. در یک گراف همبند فاصله از u تا v، $d(u,v)$، طول کوتاهترین مسیر از u تا v است.

۱-۱-۶. تعریف

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

۱-۱-۷. تعریف

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

۱-۱-۸. تعریف

افراز یک گراف، لیستی از زیرگرافها است با این شرط که هر یال دقیقاً در یک زیر گراف ظاهر شود.

۱-۱-۹. تعریف

بسیاری از مولکولها و ترکیبهای شیمیایی به شکل گراف می‌باشند که در آنها هر رأس نمایشگر یک اتم است وپیوند کوالانسی بین این اتم‌ها متناظر با یالهای موجود بین رأسهای گراف می‌باشد. به گرافی که دارای چنین ساختاری باشد، گراف مولکولی گفته می‌شود. یک گراف مولکولی می‌تواند مسیر، درخت و یا در حالت کلی یک گراف باشد.

۱-۱-۱۰. 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 ۱-۳).

شکل۱-۳

۱-۲- 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[۱] 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[۲] 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.

۱-۲-۱- نانولوله‌ها و کاربرد آنها

کربن یکی از عناصر شگفت‌انگیز در طبیعت است و کاربردهای متعدد آن در زندگی بشر به خوبی این نکته را تأیید می‌کند. به عنوان مثال فولاد، که یکی از مهمترین آلیاژهای مهندسی است، از انحلال حدود دو درصد کربن در آهن حاصل می‌شود؛ با تغییر درصد کربن (به میزان تنها چند صدم) می‌توان انواع فولاد را به‌دست آورد. "شیمی آلی" نیز علمی است که به بررسی ترکیبات حاوی کربن و هیدروژن می‌پردازد و مهندسی پلیمر هم تنها بر اساس عنصر کربن پایه‌گذاری شده است. کربن به چهار صورت گرافیت، الماس، نانولوله‌ها و بالکی‌بالها در طبیعت یافت می‌شود.

---

[1] Norio Taniguchi
[2] Kei erik drexler

اگر یک صفحه گرافیتی به لوله تبدیل شود، قطری در حد چند نانومتر پیدا می‌کند. به همین علت به چنین لوله‌هایی " نانولوله " گفته می‌شود. بسته به اینکه چگونه دو سر صفحه گرافیتی به یکدیگر متصل شده باشد، سه نوع نانولوله زیگزاگ، صندلی و نامتقارن وجود دارد.

۱-۲-۲- خواص نانولوله‌ها

هر یک از سه نوع نانولوله، به خاطر آرایش اتمی خاص خود، دارای خواصی می‌باشند که در زیر به چند ویژگی مشترک بین آنها اشاره می‌شود:

۱. **خواص مکانیکی:** نانولوله‌ها دارای پیوندهای محکمی در بین اتم‌هایشان می‌باشند و به همین علت در برابر نیروهای کششی مقاومت و استحکام زیادی از خود نشان می‌دهند. به عنوان مثال نیروی لازم برای شکستن یک نانولوله کربنی، چند برابر نیرویی است که برای شکستن یک قطعه فولاد، با ضخامت معادل یک نانولوله، احتیاج داریم. اما جالب است که بدانید پیوندهای اتمی در نانولوله‌ها علاوه بر ایجاد استحکام بالا، شکل‌پذیری آسان وحتی پیچش را درآنها میسر می‌سازد. این در حالی است که فولاد در برابر نیروهای کششی دارای مقاومت است و برای پیچش انعطاف پذیری لازم را ندارد.

۲. **خواص فیزیکی:** مهمترین خاصیت فیزیکی نانولوله‌ها، "هدایت الکترونی" آنها است. این خاصیت نانولوله‌ها بسته به زاویه و نوع پیوندها، از دسته‌ای به دسته‌ای دیگر کاملاً متفاوت است. هر چه نظم اتم‌ها بیشتر باشد، هدایت الکتریکی نیز در نانولوله‌ها بیشتر خواهد بود. تقسیم‌بندی ابتدای متن نیز بر اساس نظم اتم‌های کربن در نانولوله و در نتیجه رسانایی آنها انجام شده است.

۱-۳- اندیسهای توپولوژیکی و اهمیت آنها

۱-۳-۱- تعریف اندیس توپولوژیکی

اندیسهای توپولوژیکی اعدادی حقیقی نسبت داده شده به یک مولکول می‌باشند که با هدف مطالعه روی گرافهای مولکولی در شیمی برای بررسی ساختارهای مولکول معرفی شده‌اند و تحت یکریختی پایا می باشند. این اندیسها بر حسب پارامترهای گراف (فاصله رأسها، فاصله یالها و ...) تعریف می‌شوند [۲۶].

۱-۳-۲- اهمیت اندیسهای توپولوژیکی

با افزایش جرم مولکولی یک مولکول نقطه ذوب یا جوش آن نیز افزایش می‌یابد. اگر نمودار تغییرات جرم مولکولی بر حسب خواص آن (مثلاً نقطه ذوب) رسم شود، به هیچ وجه خطی نیست؛ لذا با داشتن یک خاصیت مولکول نمی‌توان ساختار آن را پیدا کرد. در اینجا ریاضیات به کمک ما می‌آید و به جای جرم مولکولی اعدادی را به مولکول نسبت می‌دهد. در واقع اگر اسکلت کربنی مولکول یک گراف فرض شود و به آن نمایشی ماتریسی (مثلا ماتریس مجاورت) داده شود، آن وقت با یک سری محاسبات روی این ماتریس به عددی خواهیم رسید که مختص به همان ساختار مولکول ما می‌باشد و تغییرات آن با تغییرات خواص و فعالیت مولکولها خطی می‌شود و یا از معادله‌ای مشخص پیروی می‌کند، این عدد همان اندیس توپولوژیکی می‌باشد. به چنین کارهایی در شیمی (*Quantitative Structure- Activity Relation*) *QSAR* می‌گویند.

۱-۴- اندیس وینر (*Wiener Index*)

۱-۴-۱- تعریف اندیس وینر

اندیس وینر یک گراف همبند برابر با مجموع فواصل تمامی رأسهای متمایز آن گراف است. به عبارتی دیگر:

$$W(G)=\frac{1}{2}\sum_{u,v\in V(G)} d(u,v)$$

۱-۴-۲- تاریخچه و اهمیت اندیس وینر

این اندیس، اولین اندیس توپولوژیکی بود که در سال ۱۹۴۷ توسط هارولد وینر[۳] برای تشریح روابط بین خواص شیمی- فیزیکی ترکیبات آلی مطرح شد [۲۷]. در واقع استفاده از اندیسهای توپولوژیکی در بیولوژی و شیمی برای اولین بار توسط وینر شروع شد و او این اندیس را برای تشخیص خواص فیزیکی نوعی آلکانها به نام پارافین مورد استفاده قرار داد. سایر دانشمندان کار وینر را ادامه داده و عدد وینر را با خواصی اساسی از آلکانها ارتباط دادند. در ادامه گاتمن[۴] نیز ضمن ادامه این مسیر [۱۱-۱۳] ، رابطه اندیس وینر را با خواص شیمی- فیزیکی مواد آلی غیر قطبی مورد بررسی قرار داد و یادآور شد که علیرغم نتایج بدست آمده در مورد اندیس وینر، بعضی از سؤالات هنوز حل نشده است. برای نمونه یک الگوی کلی برای محاسبه اندیس وینر گرافها وجود ندارد. یافتن این الگوی کلی در مورد گرافهای چند دوری بسیار مهم است، زیرا بسیاری از گرافهای مولکولی چند دوری هستند. بسیاری از موفقیتهای مطالعات QSAR بر پایه مفهوم عدد وینر است؛ این امر بدین علت است که اندیس وینر یک ترکیب، ارتباط قوی با خواص

3- H. Wiener

4- Ivan Gutman

شیمیایی آن ترکیب دارد. انجمن‌های بیوشیمی بااستفاده از اندیسهای توپولوژیکی از جمله اندیس وینر، همواره درصدد ایجاد یک رابطه بین گراف مولکولی ترکیبات و خواص ترکیبات با استفاده از آنچه که از راه ماشین به دست می‌آید، هستند. در ادامه باید گفت که اندیس وینر می‌تواند در ساختن یک ترکیب با خواص معیین مورد استفاده قرار گیرد. بنابراین در علم شیمی این سؤال پیش می‌آید که: "آیا برای هر اندیس وینر داده شده یک ترکیب با همان اندیس پیدا می‌شود؟".

شیوه متفاوت تأثیر داروها بر روی یک موجود زنده موضوعی است که بسیاری از دانشمندان آن را دنبال می‌کنند وبرخی دانشمندان ثابت کردند که عمل فیزیولوژی یک مولکول از دارو، تابعی از ساختار شیمیایی آن است. نشان داده شده است که بررسی خواص توپولوژیکی مولکولها، بهترین وسیله برای پیش‌بینی سریع و دقیق خواص بیولوژیکی آنهاست و یکی از مهمترین خواص توپولوژیکی مولکولها، اندیس وینر آنهاست.

با این توصیفات کار روی اندیس وینر ادامه یافت و حاصل این تلاشها، یافتن نتایج بیشتر در مورد این اندیس بود [۱۰-۱، ۱۵، ۲۰-۱۹، ۲۸]. همچنین در طول این تحقیقات، اندیسهای توپولوژیکی دیگری مانند *PI*، *Szeged*، *Schultz* و ... تعریف شدند که در زیر اشاره‌ای به تعریف این اندیسها می‌شود.

۱-۴-۳- اندیسهای *PI* و *Szeged*

فرض کنید G یک گراف هم بند باشد. مطابق با نمادهای قبل مجموعه رأسهای G با نماد $V(G)$ و مجموعه یالهای آن با $E(G)$ نمایش داده می‌شود. فرض کنید $e=uv$ یک یال گراف G باشد. دو کمیت $n_{eu}(e|G)$ و $n_{ev}(e|G)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$n_{eu}(e|G)$ تعداد یالهایی از G است که به u نسبت به v نزدیکترند و $n_{ev}(e|G)$ تعداد یالهایی از G است که به v نسبت به u نزدیکترند. همچنین تعداد یالهایی که از دو انتهای e به یک فاصله‌اند با $N(e)$ نمایش داده می‌شود. به عبارت دیگر اگر فرض شود

$G_{u,e} = \{x \in V(G) \mid d(u,x) < d(v,x)\}$ و $G_{v,e} = \{x \in V(G) \mid d(u,x) > d(v,x)\}$ و همچنین G_e رئوس آن یالهایی باشند که از دو رأس u و v به یک فاصله‌اند، آنگاه روابط زیر را خواهیم داشت:

$$N(e) = \mid E(G_e) \mid,\ n_{ev}(e \mid G) = \mid E(G_{v,e}) \mid,\ n_{eu}(e \mid G) = \mid E(G_{u,e}) \mid$$

اندیس PI گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود که در آن مجموع روی تمامی یالهای گراف G می‌باشد [۲۳-۲۲].

$$PI(G) = \sum [n_{eu}(e \mid G) + n_{ev}(e \mid G)]$$

همچنین با مفروضات بالا اندیس سِگِد گراف G که با نماد $Sz(G)$ نمایش داده می‌شود [۲۰]، به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$Sz(G) = \sum [n_{eu}(e \mid G)\, n_{ev}(e \mid G)]$$

۱-۴-۴- اندیس شولتز (*Schultz Index*)

اندیس توپولوژیکی مولکولی شولتز یک گراف شیمیایی، در سال ۱۹۸۹ توسط شولتز به صورت زیر معرفی شده است:

$$MTI(G) = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{p} v_i (A_{ij} + D_{ij})$$

که در آن v_i درجه رأس iام گراف G، A_{ij} عضو ماتریس مجاورت گراف G است که مقدار آن برابر یک است هنگامیکه دو رأس i و j مجاور باشند و در غیر این صورت صفر می باشد و D_{ij} عضو ماتریس مسافت گراف G می باشد که برابر طول فاصله میان رئوس i و jاست [۲۵].

فصل دوم

اندیس ابر وینر- یالی

در بخش اول این فصل اندیس وینر یالی نوع اول ودوم معرفی می شود. این اندیس ها اخیرا توسط علی ایرانمنش و همکارانش معرفی شده اند[۱۷]. سپس اندیس ابر وینر یالی را تعریف می کنیم[۱۸]. در بخش دوم رابطه صریح میان اندیس وینر رأسی و وینر یالی را مطرح می کنیم وسرانجام در پایان اندیس وینر یالی نوع اول ودوم نانو لوله $TUC_4C_8(S)$ را محاسبه می کنیم.

در فصل قبل با اندیس وینر راسی که مجموع بین فاصله‌های راس ها بود، آشنا شدیم. برای تعریف اندیس وینر- یالی ابتدا باید فاصله بین یال‌ها تعریف شود.

۲-۱- معرفی اندیس ابروینر- یالی

۲-۱-۱. تعریف

فرض کنید S یک مجموعه باشد. یک فاصله در S نگاشتی چون $\delta: S \times S \to \mathbb{R}$ است که برای هر $a, b, c \in S$ شرط های زیر برقرار است :

۱) $\delta(a,b) \geq 0$،

۲) $\delta(a,b) = 0 \leftrightarrow a = b$،

۳) $\delta(a,b) = \delta(b,a)$،

۴) $\delta(a,b) + \delta(b,c) \geq \delta(a,c)$.

۲-۱-۲. تعریف

فاصله بین دو راس $u, v \in V(G)$ برابر با طول کوتاهترین مسیر (تعداد یال‌ها) بین u, v است. این تعریف در شرط های تعریف فاصله صدق می‌کند.

در فصل اول اندیس وینر راسی برای گراف همبند G چنین تعریف شد: