communications in mathematical
match
and in computer chemistry

32 (1995), 207 - 219

Über die Berechnung des Wiener-Index für ausgewählte Δ-dimensionale Gitterstrukturen

Peter E. John
Technische Universität Ilmenau
Institut für Mathematik
Postfach 327
98684 Ilmenau

Abstract: The Wiener index $W = W(G)$ of a graph $G = G(M)$, that corresponds to a molecule or structure M, plays an important role in connection whith physico-chemical properties of M, e.g.: boiling point, heat of formation, crystal defects ... This paper presents a simple method to calculate $W(G)$ if G is a Δ-dimensional lattice graph.

1 Einführung

Sei $G = (V, E)$ ein zusammenhängender schlichter Graph mit der Knotenpunktmenge $V = V(G) = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$ und der Kantenmenge $E = E(G)$. Weiter seien $P_{ij} = P(v_i, v_j)$ **ein** kürzester, die Knotenpunkte $v_i, v_j \in V \quad (i, j = 1, 2, ..., n)$ verbindender Weg und $d_{ij} = d(v_i, v_j)$ dessen Länge (Anzahl der Kanten von P_{ij}; Distanz der Knotenpunkte v_i, v_j) in G. Die $d_{ij} - s$ bilden eine symmetrische quadratische Matrix $D = D(G) = (d_{ij})$ n-ter Ordnung, welche auch als **Distanzmatrix** von G bezeichnet wird.
Der **Wiener-Index** $W = W(G)$ von G ist gleich der halben Summe aller $d_{ij} - s$ von D (siehe Abb. 1):

$$(1) \qquad W = W(G) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij} = \sum_{1 \le i < j \le n} d_{ij}$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{v' \in V(G)}\sum_{v'' \in V(G)} d(v', v'') = \frac{1}{2}\sum_{v', v'' \in V(G)} d(v', v'')$$

Es sei $\underline{P} = \underline{P}(G)$ diejenige Menge aller kürzesten Wege von G, in welcher für jedes Knotenpunktpaar (v_i, v_j) genau ein kürzester Weg enthalten ist. Offensichtlich ist $\underline{P}(G)$ nicht für jeden Graphen G eindeutig bestimmt. Ist zum Beispiel $G = T$ ein Baum, so existiert genau ein $\underline{P} = \underline{P}(T)$ während für den in Abb. 1 gegebenen Graphen G_1 wenigstens zwei solcher Wegesysteme $\underline{P}'(G_1), \underline{P}''(G_1)$ existieren.
Bezeichne $d(P)$ die Länge eines Weges $P \in \underline{P}(G)$, so ist

$$d(P) = \sum_{e \in E(P)} 1$$

und wir erhalten

(1′)
$$W(G) = \sum_{P \in \underline{P}(G)} d(P).$$

Für $e \in E(G)$ seien $\underline{P}(e)$ die Menge und $w(e) = w(e, \underline{P}(G)) = |\underline{P}(e)|$ die Anzahl aller Wege $P \in \underline{P}(G)$, für die $e \in E(P)$ ist, also

$$w(e) = \sum_{P \in \underline{P}(e)} 1$$

und es gilt

(1″)
$$W(G) = \sum_{e \in E(G)} w(e).$$

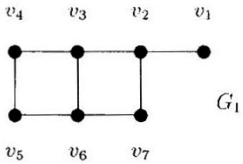
Aus (1′) und (1″) folgt

(1‴)
$$W(G) = \sum_{P \in \underline{P}(G)} \sum_{e \in E(P)} 1 = \sum_{e \in E(G)} \sum_{P \in \underline{P}(e)} 1.$$

Es sei angemerkt, daß im Falle zweier verschiedener Wegemengen $\underline{P}'(G) \neq \underline{P}''(G)$ von G wenigstens ein $e \in E(G)$ existiert, für das $w'(e) = w(e, \underline{P}'(G)) \neq w(e, \underline{P}''(G)) = w''(e)$ ist, jedoch

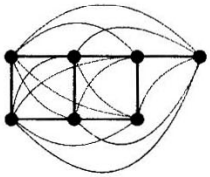
$$\sum_{e \in E(G)} w'(e) = \sum_{e \in E(G)} w''(e)$$

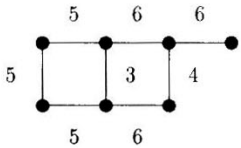
gilt.
Im Jahre 1947 wurde dieser Index von H. Wiener [1, 2] im Zusammenhang mit physikochemischen Eigenschaften baumartiger Moleküle (Alkane) eingeführt.



$$D(G_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 3 & 2 \\ & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 \\ & & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ & & & 0 & 1 & 2 & 3 \\ & & & & 0 & 1 & 2 \\ & & & & & 0 & 1 \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

$$W(G_1) = 8 \cdot 1 + 8 \cdot 2 + 4 \cdot 3 + 1 \cdot 4 = 40$$





$$W(G_1) = 1 \cdot 3 + 1 \cdot 4 + 3 \cdot 5 + 3 \cdot 6 = 40$$

Abbildung 1

Im Jahre 1971 wurde von H. Hosoya [3] das Wiener-Konzept auf beliebige Graphen übertragen und Gleichung (1) formuliert. Mehr Informationen zu $D(G)$ und $W(G)$ eines Graphen G findet der Leser z. B. in Arbeiten von D.H. Rouvray [4], P. Senn [5], B. Mohar und T. Pisanski [6], O.E. Polansky und D. Bonchev [7], I. Lukovits [8], I. Gutman, Y-N. Yeh, Sh-L. Lee und Y-L. Luo [9] und Y-N. Yeh und I. Gutman [10]. Für einige spezielle Klassen von Graphen (siehe Abbildung 2, $n = 5$) sind explizite Formeln zur Berechnung von W bekannt (siehe z. B. [7]):

$$
\begin{array}{lll}
G = P_n \text{ (Weg)} & : & W(P_n) = \binom{n+1}{3} \\
G = S_n \text{ (Stern)} & : & W(S_n) = (n-1)^2 \\
G = C_n \text{ (Kreis)} & : & W(C_n) = \begin{cases} \frac{n}{8} \cdot n^2, & n \text{ gerade} \\ \frac{n}{8} \cdot (n^2 - 1), & n \text{ ungerade} \end{cases} \\
G = K_n \text{ (vollständiger Graph)} & : & W(K_n) = \binom{n}{2}.
\end{array}
$$

Offensichtlich gilt für $W(G)$ von G mit n Knotenpunkten

$$W(K_n) \leq W(G) \leq W(P_n).$$

In den 80-er Jahren haben D. Bonchev, H.-G. Fritsche und O. Mekenyan den Wiener-Index zur Interpretation von Kristallgitterdefekten [11] und von Metallclustern [12, 13] bzw. im Zusammenhang mit Fragen des Kristallwachstums [14] erfolgreich verwendet. Deshalb möchten wir eine einfach handhabbare Methode zur Berechnung von $W(G)$ für ausgewählte Gittergraphen G vorstellen.

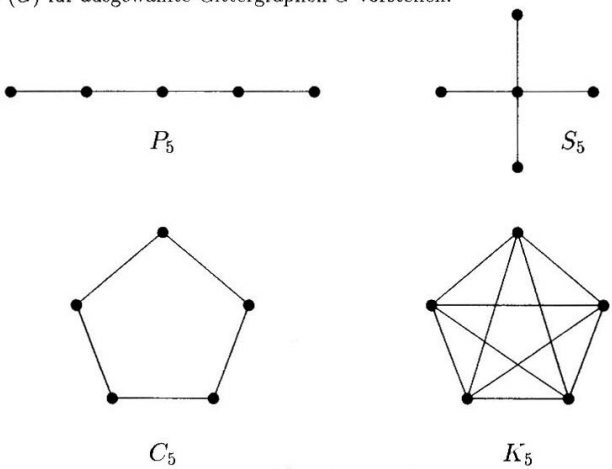


Abbildung 2

2 Konvexe und quasikonvexe Gittergraphen

Es sei $\Lambda^{(\Delta)}$ ein Δ-dimensionales Gitter. Wir identifizieren $\Lambda^{(\Delta)}$ mit der Punktmenge

$$\Lambda^{(\Delta)} = \{(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_\Delta) | \lambda_k \in \{0, \pm 1, \pm 2, ...\}, \quad k = 1, 2, ..., \Delta\}$$

des Δ-dimensionalen Gitters.
Sei

$$S^{(\Delta)} = S(n_1, n_2, ..., n_\Delta) = \{(s_1, s_2, ..., s_\Delta) | s_k \in \{1, 2, ..., n_k\}, n_k \geq 1, \quad k = 1, 2, ..., \Delta\}.$$

$S^{(\Delta)}$ determiniert einen Graphen $G^{(\Delta)} = G(S^{(\Delta)}) = G(n_1, n_2, ..., n_\Delta) = (V^{(\Delta)}, E^{(\Delta)})$ mit der Knotenpunktmenge

$$V^{(\Delta)} = V(G^{(\Delta)}) = S^{(\Delta)} \subset \Lambda^{(\Delta)}$$

und der Kantenmenge

$$E^{(\Delta)} = E(G^{(\Delta)}) = \{(x, y) | x, y \in S^{(\Delta)} \text{und} |x - y| = 1\}$$

(siehe Abb. 3).

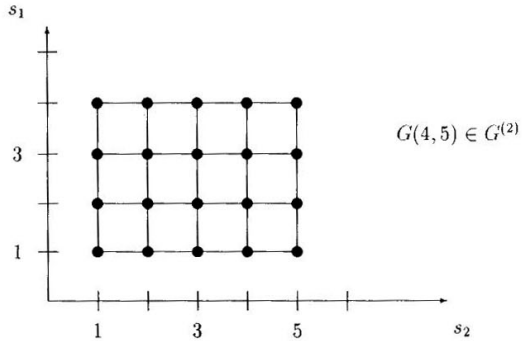


Abbildung 3

Graph $G^{(\Delta)}$ werde kurz als **Δ-dimensionaler Gittergraph** bezeichnet.
Es seien $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_\Delta)$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, ..., y_\Delta) \in V^{(\Delta)}$.
Offensichtlich ist

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G^{(\Delta)}) = \sum_{k=1}^{\Delta} |x_k - y_k|. \tag{2}$$

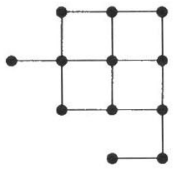
Sei $G = (V, E)$ ein (zusammenhängender) Untergraph von $G^{(\Delta)}$ und sei $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G)$ die Länge eines kürzesten Weges zwischen $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V(G)$ von G. Graph G heiße **konvexer Gittergraph** genau dann, wenn

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G) = d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G^{(\Delta)}) \tag{3}$$

gilt. So ist Graph G_1 (Abb. 1) konvexer Gittergraph, während G_2 (Abb. 4) kein konvexer Gittergraph ist.
Graph G heiße **quasi-konvexer Gittergraph**, falls es einen konvexen Gittergraphen

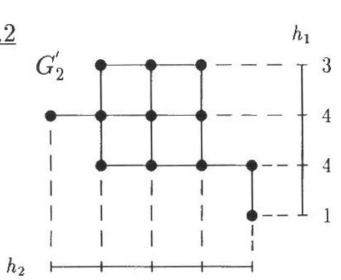
G' gibt, welcher zu G isomorph ist ($G = (V, E)$ und $G' = (V', E')$ heißen isomorph, falls es eine bijektive Abbildung φ derart gibt, daß (i) für jedes $x \in V$ ein $x' = \varphi(x) \in V'$ und (ii) für jede Kante $(x, y) \in E$ eine Kante $(x', y') = (\varphi(x), \varphi(y)) \in E'$ existiert).

4.1



G_2

4.2



	3	4	4	1
3	0	12	24	9
4		0	16	16
4			0	4
1				0

4.3$_1$

1	0	3	6	9	8
3		0	9	18	18
3			0	9	12
3				0	6
2					0

4.3$_2$

$W_1(G_2') = 4 + 9 + 12 + 2 \cdot 16 + 24 = 81$

$W_2(G_2') = 3 + 2 \cdot 6 + 8 + 3 \cdot 9 + 12 + 2 \cdot 18 = 98$

$W(G_2) = 81 + 98 = 179$

Abbildung 4

Der in Abb. 4.1 dargestellte Graph G_2 ist quasikonvexer Gittergraph, da (wenigstens) ein zu G_2 isomorpher konvexer Gittergraph G_2' (s. Abb. 4.2) existiert.

Für die Wiener-Indizes von G und G' gilt:

$$W(G') = W(G). \tag{4}$$

Deshalb genügt es, konvexe Δ-dimensionale Gittergraphen zu betrachten, wobei für praktische Belange $\Delta = 2, 3$ gesetzt wird.

3 Berechnung des Wiener-Index für konvexe Gittergraphen

Es sei $G = (V, E)$ ein konvexer Gittergraph. Wegen (1) ist

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in V(G)} d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in V(G)} d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; G^{(\Delta)}), \text{ wegen (3)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in V(G)} \sum_{k=1}^{\Delta} |x_k - y_k|, \text{ wegen (2)} \end{aligned}$$

und nach dem Vertauschen der Summationsreihenfolge erhalten wir

$$W(G) = \sum_{k=1}^{\Delta} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in V(G)} |x_k - y_k| \right\}. \tag{5}$$

Der in Klammern stehende Term von (5) kann als Wiener-Index $W_k = W_k(G)$ von G bezüglich der k-ten Koordinate angesehen werden:

$$W_k(G) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in V(G)} |x_k - y_k|. \tag{6}$$

Wegen (6) und (5) haben wir

$$W(G) = \sum_{k=1}^{\Delta} W_k(G). \tag{7}$$

Die beiden letzten Gleichungen gestatten auf einfache Weise die Berechnung von $W(G)$, falls G konvexer Untergraph von $G^{(\Delta)}$ ist. Zunächst berechnen wir für $k = 1, 2, ..., \Delta$ die Größe $W_k(G)$:
Für alle $\mathbf{x} \in V(G)$ und jedes k gibt es Zahlen $l_0 = l_0(k) \geq 1$ und $l^0 = l^0(k) \leq n_k$ so, daß

$$l_0 \leq x_k \leq l^0$$

gilt.
Für $x_k = l(k) = l$ seien $V_k^l = V_k^l(G) = \{\mathbf{x} | \mathbf{x} \in V(G) \text{ und } x_k = l\}$ die Menge und $n_k^l = n_k^l(G) = |V_k^l|$ die Anzahl der Knotenpunkte von G, die als k-te Koordinate $l = l(k)$ haben:

$$\sum_{\substack{\mathbf{x} \in V(G) \\ x_k = l}} 1 = n_k^l$$

Offensichtlich gilt für jedes k

$$\sum_{l_0 \le l \le l^0} n_k^l(G) = n(G).$$

Setzen wir in (6) $x_k = l'(k) = l'$ und $y_k = l''(k) = l''$, $l_0 \le l'$, $l'' \le l^0$, so finden wir für den Wiener-Index von G bezüglich der k-ten Koordinate:

$$\begin{aligned} W_k(G) &= \frac{1}{2} \sum_{l_0 \le l', l'' \le l^0} \left\{ \sum_{\substack{\mathbf{x} \in V(G) \\ x_k = l'}} \sum_{\substack{\mathbf{y} \in V(G) \\ y_k = l''}} |l' - l''| \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l_0 \le l', l'' \le l^0} \left\{ \left(\sum_{\substack{\mathbf{x} \in V(G) \\ x_k = l'}} \sum_{\substack{\mathbf{y} \in V(G) \\ y_k = l''}} 1 \right) \cdot |l' - l''| \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l_0 \le l', l'' \le l^0} \left\{ n_k^{l'} \cdot n_k^{l''} \cdot |l' - l''| \right\} \end{aligned}$$

bzw.

$$W_k(G) = \sum_{l_0 \le l' < l'' \le l^0} n_k^{l'} \cdot n_k^{l''} \cdot (l'' - l'). \tag{8}$$

Mit Gleichung (7) ist schließlich $W(G)$ bestimmt. Als Beispiel wählen wir den in Abbildung 4 dargestellten quasikonvexen Gittergraphen G_2 (Abb. 4.1), welcher zunächst in den (zu ihm isomorphen) konvexen Gittergraphen G_2' (Abb. 4.2) überführt wird. Die Berechnung von $W_k(G_2')$, $k = 1, 2$, ist in Abb. 4.3 zu sehen. Hierbei haben wir für die k-te Koordinate eine Hilfslinie h_k, parallel zu s_k, eingezeichnet und auf dieser die Größen n_k^l als Anzahlen von Knotenpunkten $\mathbf{x} \in V(G)$, für die $x_k = l$ ist, angetragen. Jedem Summanden aus (8) entspricht genau ein Zahlenwert des sich an h_k anfügenden Schemas 4.3_k. (In 4.3_1 : $\underline{12} = n_1^1 \cdot n_1^2 \cdot (2-1) = 3 \cdot 4 \cdot 1$, in 4.3_2 : $\underline{\underline{18}} = n_2^2 \cdot n_2^5 \cdot (5-2) = 3 \cdot 2 \cdot 3$).

4 Spezielle Δ-dimensionale konvexe Gittergraphen

4.1 Gegeben sei der Graph $G = G^{(\Delta)}$, welcher konvex ist. Für jedes $l = l(k) = 1, 2, ..., n_k$ ist

$$n_k^l = \frac{1}{n_k} \cdot \prod_{j=1}^{\Delta} n_j = \frac{n(G)}{n_k} = \frac{n}{n_k}$$

und wegen (8) haben wir

$$W_k(G) = \left(\frac{n}{n_k}\right)^2 \cdot \sum_{1 \le l' < l'' \le n_k} (l'' - l'). \tag{9}$$

Die Summe in (9) ist gleich dem Wiener-Index eines Weges mit n_k Knotenpunkten:

$$\begin{aligned} \sum_{1 \le l' < l'' \le n_k} (l'' - l') &= \sum_{1 \le l' \le n_k} \sum_{1 \le l'' \le n_k - l'} l' \\ &= \sum_{1 \le l' \le n_k} (n_k - l') \cdot l' = \binom{n_k + 1}{3}. \end{aligned}$$

Deshalb ist

$$W_k(G) = \binom{n}{n_k}^2 \binom{n_k + 1}{3} = \frac{n^2}{6}\left(n_k - \frac{1}{n_k}\right) \tag{10}$$

und wegen (7)

$$W(G) = \frac{n^2}{6} \cdot \sum_{k=1}^{\Delta} \left(n_k - \frac{1}{n_k}\right). \tag{11}$$

Falls $n_1 = n_2 = \ldots = n_\Delta =: N(\ge 1)$, werde der resultierende Graph mit $G(N)$ bezeichnet ($n(G(N)) = N^\Delta$) und wir erhalten

$$W(G(N)) = \frac{\Delta}{6} \cdot N^{2\Delta+1} \cdot \left(1 - \frac{1}{N^2}\right) \tag{12}$$

bzw. (bei festem Δ) den folgenden Grenzwert

$$\lim_{N \to \infty} \frac{W(G(N))}{\{n(G(N))\}^{2+1/\Delta}} = \frac{\Delta}{6}. \tag{13}$$

4.2 Seien $\{G_i(p)\}$ für $i = 3, 4$ zwei Serien von Graphen $G_i(p)$, $p = 1, 2, 3, \ldots$, wie in Abb. 5 zu sehen. Für beide Serien gilt $\Delta = 2$. Die Wiener-Indizes $W_i(p) = W(G_i(p))$ von $G_i(p)$ sind:

$$\begin{aligned} W_3(p) &= \frac{1}{3}(p+1)^5 \left(1 - \frac{1}{(p+1)^2}\right), \text{ wegen (12)}, \\ &\text{bzw.} \\ W_4(p) &= \frac{28}{15} p \left(p + \frac{1}{2}\right)(p+1) \cdot \left(p^2 + p - \frac{4}{7}\right), \text{ wegen (8)}. \end{aligned} \tag{14}$$

Sei $n_i(p) = n(G_i(p))$ die Anzahl der Knotenpunkte von $G_i(p)$, also $n_3(p) = (p+1)^2$, $n_4(p) = 2p(p+1)$. Die Grenzwerte ($i = 3, 4$)

$$\lim_{p \to \infty} \frac{W_i(p)}{\{n_i(p)\}^{2+1/2}} = \begin{cases} \frac{1}{3}, & \text{falls } i = 3 \\ \frac{7\sqrt{2}}{30}, & \text{falls } i = 4 \end{cases} \tag{15}$$

zeigen, daß die Ränder $R_i(p) = R(G_i(p))$ von $G_i(p)$ eine wichtige Rolle bei der Untersuchung des asymptotischen Verhaltens von Gitterstrukturen spielen. Analoge Aussagen sind auch für $\Delta > 2$ möglich.

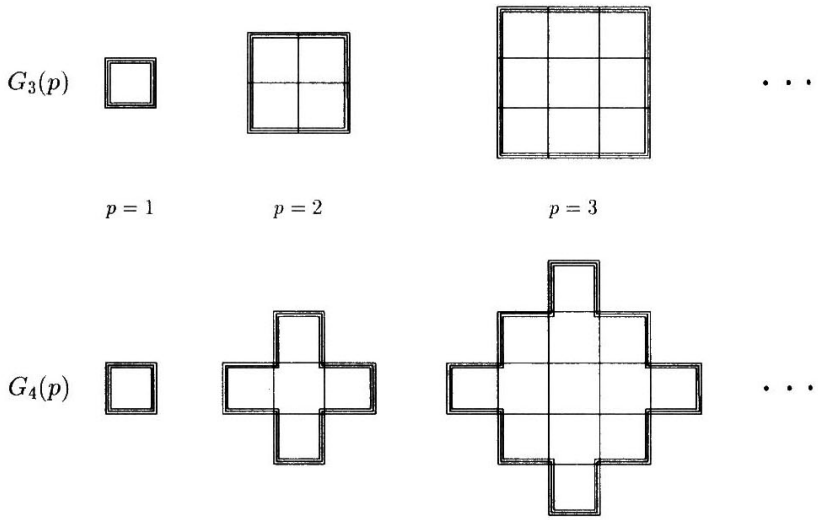


Abbildung 5

5 Abschließende Bemerkungen

5.1 Die hier beschriebene Methode zur Berechnung des Wiener-Index eines konvexen Gittergraphen kann auch auf andere (planare) Gitterstrukturen angewandt werden. Für den in Abb. 6 dargestellten Graphen $\triangleright_0$ ist die Berechnung von $W_i(\triangleright_0)$, $i = 1, 2, 3$, nach obigem Schema erfolgt. Offensichtlich ergibt sich hier der Wiener-Index zu

$$W(\triangleright_0) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^{3} W_i(\triangleright_0),$$

da jede Kante eines kürzesten Weges von $\triangleright_0$ in genau zwei der Summen $W_i(\triangleright_0)$ berücksichtigt wird.

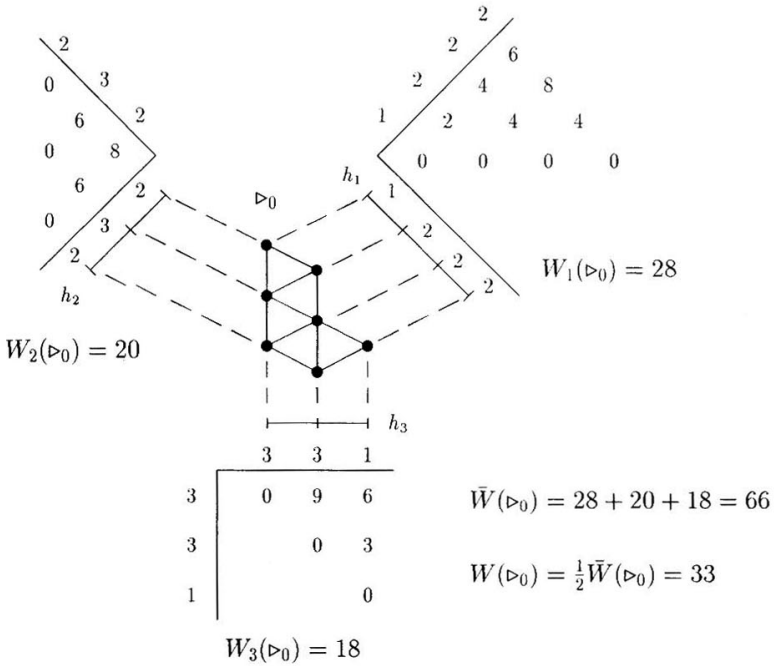


Abbildung 6

5.2 Wird den Untersuchungen anstelle der Menge $\underline{P} = \underline{P}(G)$ von G eine Menge $\underline{P}^* = \underline{P}^*(G)$ von Wegen in G mit der Eigenschaft ε^* zugrunde gelegt, so erhalten wir analog zu obigen Überlegungen einen bezüglich der Eigenschaft ε^* "gesternten" Wiener-Index

$$W^* = W^*(G) = \sum_{P^* \in \underline{P}^*(G)} \sum_{e \in E(P^*)} 1. \tag{16}$$

Hier könnte Eigenschaft ε^* z. B. ersetzt werden durch die Menge aller kürzesten Wege oder durch die Menge der längsten Wege ... .
Betrachten wir z. B. die letztgenannte Eigenschaft ε^*: Menge $\underline{P}^* = \underline{P}^*(G)$ der längsten Wege von G, wobei für jedes Paar unterschiedlicher Knotenpunkte genau ein solcher Weg in $\underline{P}^*$ enthalten sei. Dann finden wir

$$W^*(G) = W(G), \text{ falls } G = T \text{ ein Baum,}$$

$$
\begin{aligned}
W^*(C_n) &= 3 \cdot W(C_n) - \begin{cases} \frac{n^2}{2}, & \textit{falls } n \textit{ gerade} \\ \frac{n^2-n}{2}, & \textit{falls } n \textit{ ungerade} \end{cases} \\
W^*(K_n) &= (n-1) \cdot W(K_n).
\end{aligned}
$$

Offensichtlich gelten für einen zusammenhängenden schlichten Graphen G mit n Knotenpunkten bezüglich der hier gewählten Eigenschaft ε^*:

$$W^*(S_n) \leq W^*(G) \leq W^*(K_n)$$

und

$$2 \cdot (n-1)^2 \leq W(G) + W^*(G) \leq n\binom{n}{2}.$$

5.3 Für $n \geq 2$ $q = 0, 1, \ldots,$ bezeichne

$$W^q = W^q(G) = \sum_{P \in \underline{P}(G)} d^q(P) \tag{17}$$

das **q-te Moment des Wiener-Index** von G. Offensichtlich gelten $W^0(G) = \binom{n}{2}$ und $W^1(G) = W(G)$. Eventuell bieten die q-ten Momente ($q \geq 2$) weitere Möglichkeiten zur Korrelation mit physiko-chemischen Eigenschaften von Molekülen.

Literatur

[1] Wiener, H.: Structural determination of paraffin boiling points. J. Amer. Chem. Soc. 69 (1947), 17-20.

[2] Wiener, H.: Correlation of heats of isomerization, and differences in heats of vaporization of isomers, among the paraffin hydrocarbons. J. Amer. Chem. Soc. 69 (1947), 2636-2638.

[3] Hosoya, H.: Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. Bull. Chem. Soc. Japan 44 (1971), 2332-2339.

[4] Rouvray, D.H.: The role of the topological distance matrix in chemistry. In: Mathematics and computational concepts in chemistry (Ed.: N. Trinajstić), John Wiley et Sons, New York-Chichester-Brisbane- Toronto, 1986, pp. 295-306.

[5] Senn, P.: The computation of the distance matrix and the Wiener index for graphs of arbitrary complexity with weighted vertices and edges. Comput. Chem. 12 (1988), 219-227.

[6] Mohar, B. and T. Pisanski: How to compute the Wiener index of a graph. J. Math. Chem. 2 (1988), 267-277.

[7] Polansky, O.E. and D. Bonchev: The Wiener number of graphs. I. general theory and changes due to some graph operations. Match (Mülheim) 21 (1986), 133-186.

[8] Lukovits, I.: Wiener Indices and partition coefficients of unsaturated hydrocarbons. Quant. Struct. Act. Relat. 9 (1990), 227-231.

[9] Gutman, I., Y-N. Yeh, Sh-L. Lee and Y-L. Luo: Some recent results in the theory of the Wiener number. Ind. J. Chem. 32 A (1993), 651-661.

[10] Yeh, Y-N. and I. Gutman: On the sum of all distances in composite graphs. Discr. Math. 135 (1994), 359-365.

[11] Mekenyan, O., D. Bonchev and H.-G. Fritsche: A topological approach to crystal defect studies. Z. phys. Chem., Leipzig, 265 (1984), 959-967.

[12] Fritsche, H.-G., D. Bonchev and O. Mekenyan: On the topologies of $(M_{13})_{13}$ superclusters of ruthenium, rhodium and gold. J. Less-Comm. Metals, 141 (1988), 137-143.

[13] Fritsche, H.-G., D. Bonchev and O. Mekenyan: The optimum topology of small clusters. Z. phys. Chem., Leipzig, 270 (1989), 469-476.

[14] Bonchev, D., O. Mekenyan and H. Fritsche: An approach to the topological modelling of crystal growth. J. Cryst. Growth 49 (1980), 90-96.