

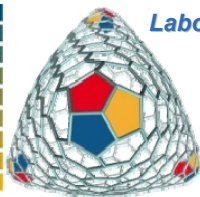
UNIVERSITATEA DE VEST DIN TIMIȘOARA
FACULTATEA DE CHIMIE, BIOLOGIE, GEOGRAFIE
DEPARTAMENTUL DE BIOLOGIE-CHIMIE
Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și
Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR
(L-CF-SC-NQ)

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara
Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620
mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro
www.mvputz.iqstorm.ro

INTRODUCERE **ÎN CHIMIA STRUCTURALĂ** **NANO-TOPOLOGICĂ**

Director Științific Curs & L-CF-SC-NQ:
Conf. Dr. Dr. Habil. Mihai V. PUTZ

Doctorand Curs:
Marina-Alexandra TUDORAN



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

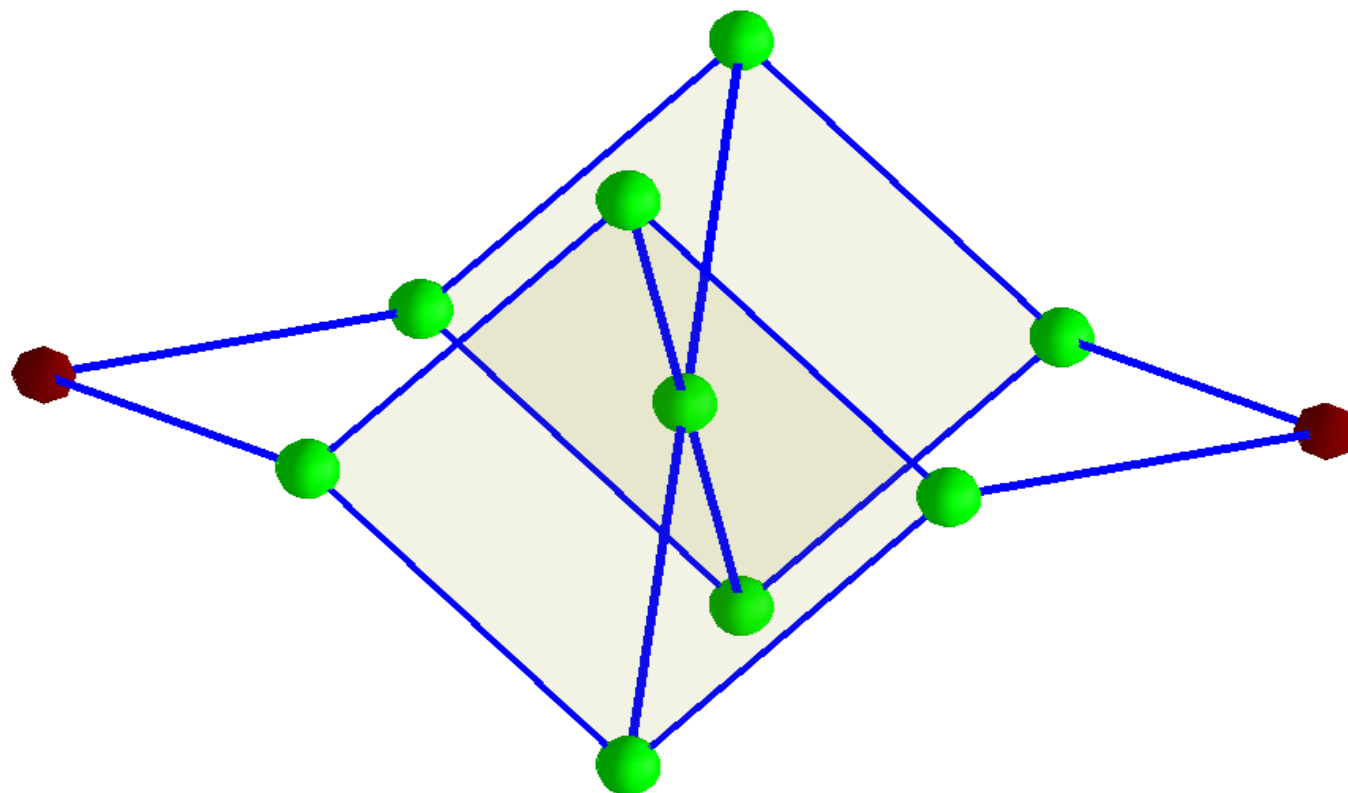
Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Director Științific: Conf. dr. dr. Habil. Mihai V. PUTZ

Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620

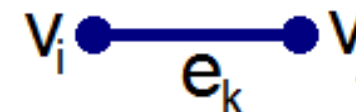
mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro

1. ELEMENTE DE TOPOLOGIE MOLECULARĂ



1. **Graf neorientat** : o pereche ordonată de mulțimi notată $G = (V, E)$ cu $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ reprezintă **vârfuri**, iar $E = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ reprezintă **muchii**.

Reprezentarea pictorială a grafului: elementele mulțimii V sunt reprezentate prin perechi de puncte (v_i, v_j) care se unesc cu o linie, dacă și numai dacă $(v_i, v_j) \in E$.



Se consideră muchia $e_k = (v_i, v_j)$. Atunci:

- vârfurile v_i și v_j sunt **adiacente** și se numesc extremitățile muchiei e_k ;
- muchia e_k și vârful v_i sunt **incidente** în graf, la fel, muchia e_k și vârful v_j ;
- muchia (v_i, v_j) este aceeași cu (v_j, v_i) .

Gradul unui vârf v_i - $d(v_i)$: numărul muchiilor care trec prin vârful v_i :

- $d(v_i) = 0 \Rightarrow$ **vârf izolat**.
- $d(v_i) = 1 \Rightarrow$ **vârf terminal**.



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620

mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro

Teorema 1:

Într-un graf $G = (V, E)$, cu $v = |V|$ vârfuri și $e = |E|$ muchii, suma gradelor tuturor vârfurilor este egală cu $2 \times$ numărul muchiilor.

$$\sum_{i=1}^v d(v_i) = d(v_1) + d(v_2) + \dots + d(v_v) = 2e$$

Exercițiul 1:

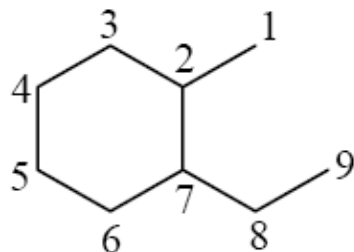


Figura 1: Graf neorientat

Determinați: mulțimea vârfurilor, muchiile, gradul vârfurilor, vârfuri adiacente, vârfuri terminale .

$$\sum_{i=1}^9 d(x_i) = ?$$



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620

mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro

Cel mai simplu model al structurii chimice este **graful molecular**, unde **vârfurile** reprezintă **atomi**, iar **muchiile** - **legături chimice** (covalente). Un graf molecular este întotdeauna **conex** și **neorientat**.

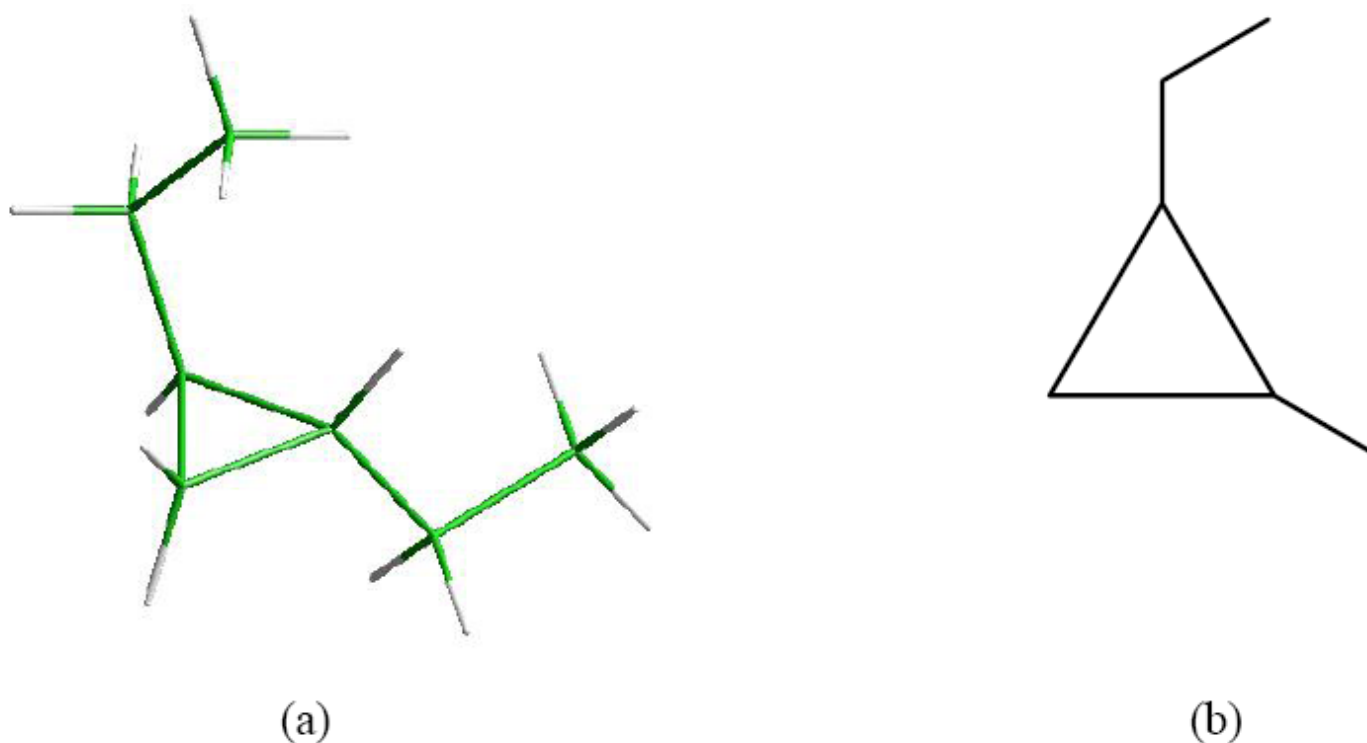


Figura 1: O structură chimică și graful molecular corespunzător



2. Multigraf: un graf ce conține legături multiple (exp. Benzenul).

Se numește **drum** (*walk*) o secvență alternantă de vârfuri și muchii, $w(1,n) = (v_1, e_1, v_2, e_2, \dots, v_{n-1}, e_m, v_n)$, $v_i \in V(G)$, $e_i \in E(G)$, $m \geq n-1$, parcursă astfel încât oricare două varfuri succesive sunt adiacente: $(v_{i-1}, v_i) \in E(G)$.

Lungimea drumului: numărul muchiilor traversate.

Drum închis (*self-returning walk*) este drumul ce pornește și sfârșește în același vârf, $v_n = v_1$. Altfel drumul este **deschis**.

Se numește **cale** (*drum elementar* sau *path* sau *self-avoiding walk*) drumul care are toate vârfurile și muchiile distincte două câte două: $v_i \neq v_j$, $(v_{i-1}, v_i) \neq (v_{j-1}, v_j)$, pentru oricare $1 \leq i < j \leq n$.



Se numește **ciclu** (*cyclic path*) într-un graf, o cale cu proprietatea că punctele de plecare și sosire coincid. Pot fi **grafuri ciclice** și **grafuri aciclice**.

Exercițiul 2:

Pentru graful din Figura 1 identificați: drumul elementar/ cale, drumul ne-elementar, drumul închis și ciclul.

Un graf G este **conex** dacă oricare două vârfuri ale sale sunt extremitățile unui drum al grafului.

Distanța topologică între vârfurile i și j , notată d_{ij} , reprezintă lungimea căii minime dintre i și j .

Distanța metrică reprezintă distanța măsurată în metri (ori submultipli: nm, pm) între două vârfuri.



3. Graf complet: oricare două vârfuri diferite sunt adiacente. Un graf complet cu n vârfuri se notează cu K_n .

Numărul muchiilor într-un graf complet este: $\binom{n}{2} = n(n-1)/2$

4. Graf regulat: toate vârfurile au același grad.

Un **subgraf** al unui graf $G = (V, E)$ este un graf $G_1 = (V_1, E_1)$, unde $V_1 \subset V$ și $E_1 \subset E$ reprezintă toate muchiile care au ambele extremități în V_1 .

5. Graf parțial: graful $H = (V_1, E_1)$ cu $V_1 = V$, și $E_1 \subset E$, ce se obține din G prin suprimarea anumitor muchii.

6. Graf bipartit: graful $G = (V, E)$ în care mulțimea vârfurilor poate fi partiționată în două submulțimi disjuncte, $V_1 \cup V_2 = V$; $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ astfel încât fiecare muchie $(i, j) \in E(G)$ unește un vârf $i \in V_1$ cu vârful $j \in V_2$.



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620

mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro

Dacă fiecare vârf $i \in V_1$ este adiacent cu fiecare vârf $j \in V_2$ atunci G este un **graf bipartit complet** și se notează cu $K_{m,n}$.

6. Graf homeomorf: graful obținut prin inserarea pe muchiile lui G a unor vârfuri de valență doi.

7. Graf planar: poate fi desenat într-un plan astfel încât nici o muchie să nu se întretaie cu alta decât cel mult prin extremitățile lor. Regiunile definite de un graf planar se numesc **fețe**.

Teorema 2 (Kuratowski):

Un graf este planar dacă și numai dacă nu are nici un subgraf homeomorf cu $K_{3,3}$ sau K_5 .



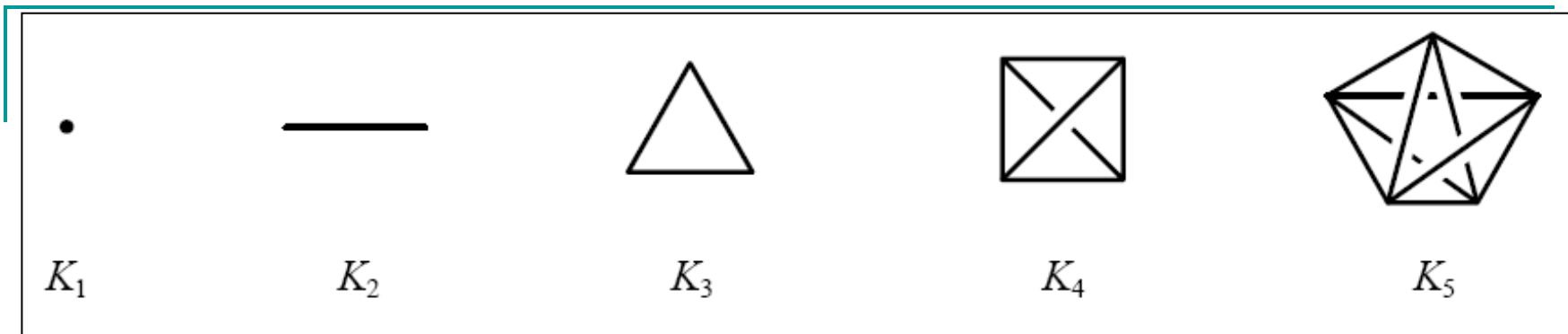


Figura 2: Grafuri complete

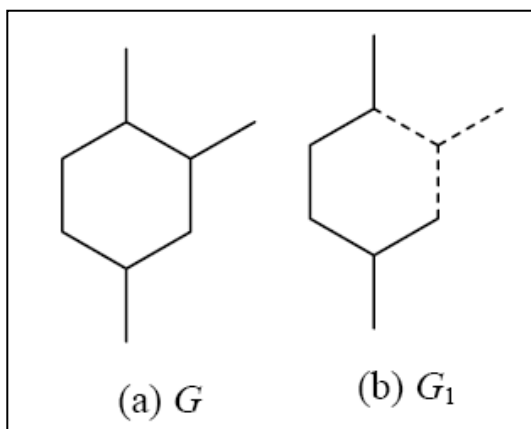
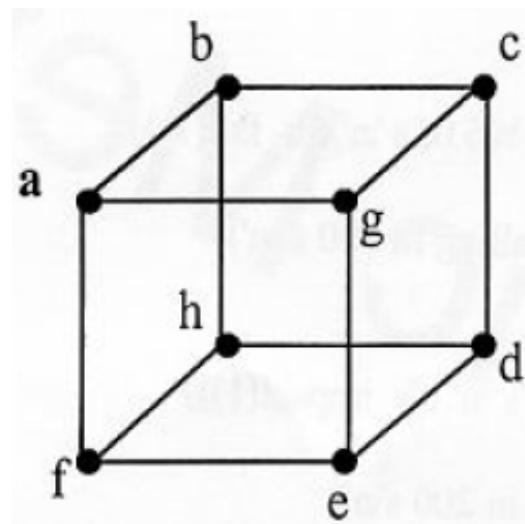


Figura 3: Exemplu de graf și un subgraf al său



$$V_1 = \{a, c, e, h\}$$

$$V_2 = \{b, d, f, g\}$$

Figura 4: Graf bipartit

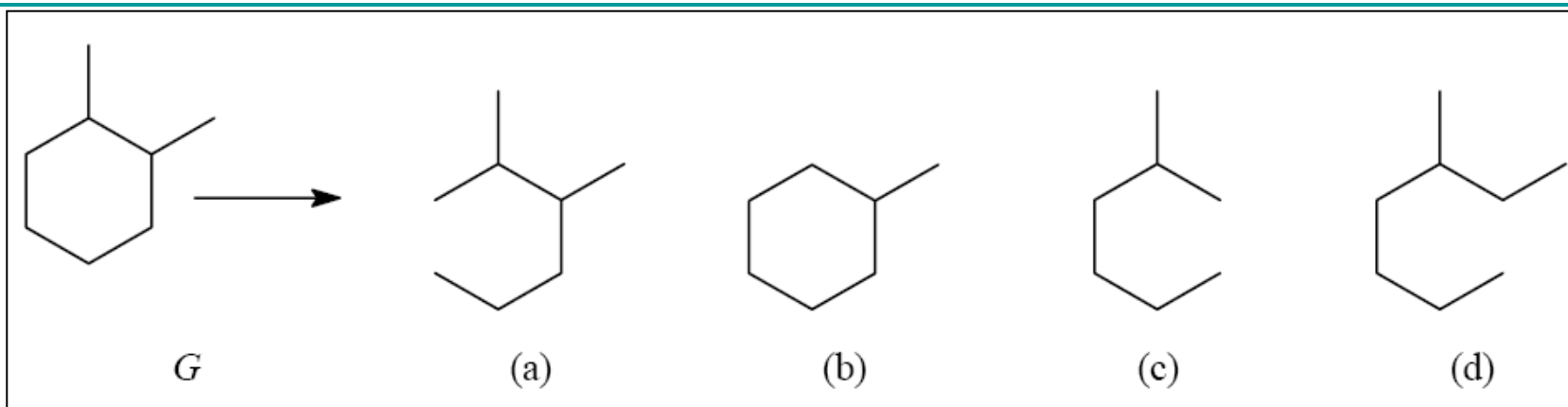


Figura 5: Grafuri parțiale

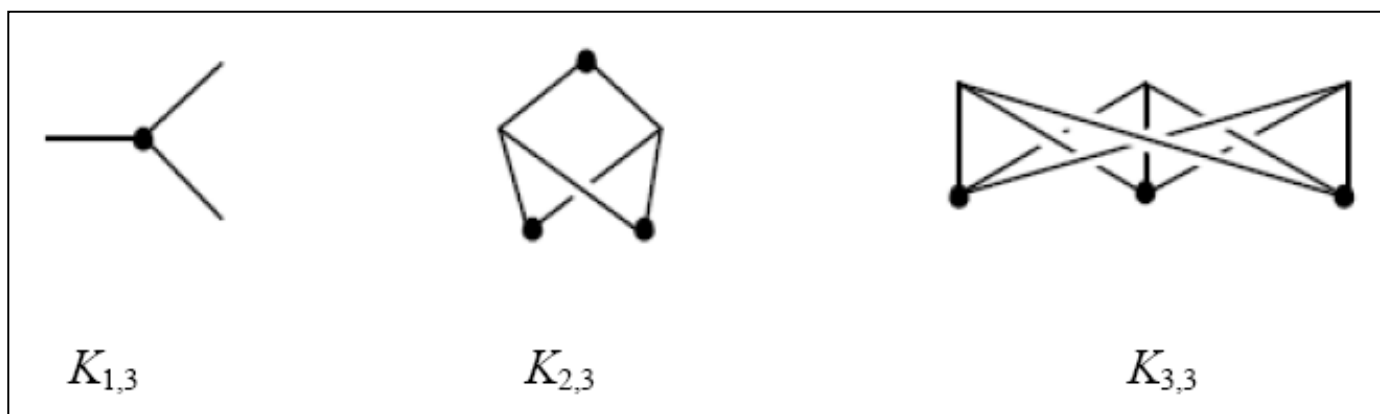


Figura 6: Grafuri bipartite complete

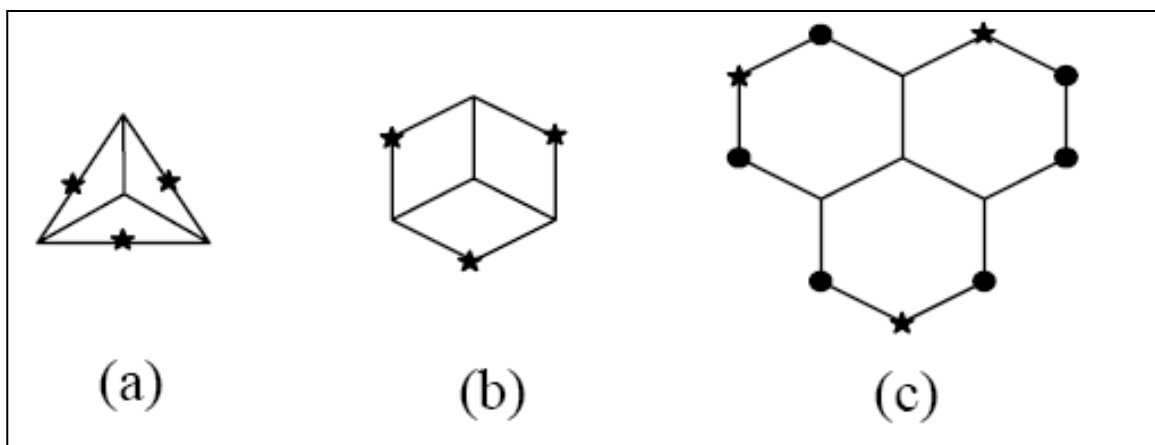


Figura 7: Grafuri homeomorfe

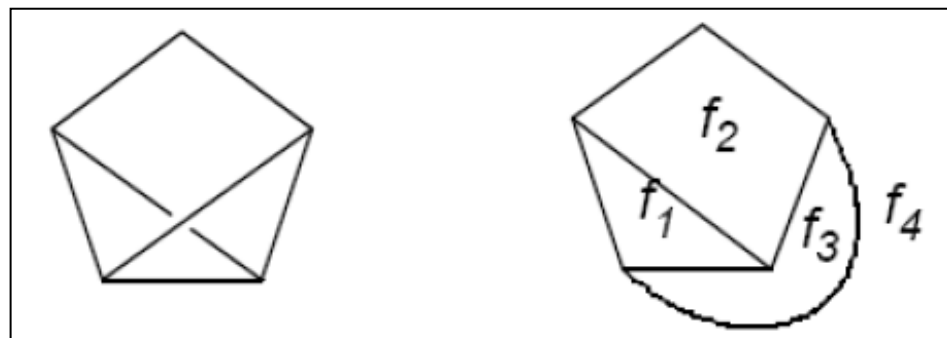


Figura 8: Un graf planar și fețele lui

Parcurgerea unui graf neorientat – metode:

a) Metoda de parcurgere “în lățime” (BF): se vizitează vârful de pornire, după care se vizitează toate vârfurile adiacente cu acesta (toți vecinii). În continuare se alege primul vârf adiacent cu vârful de pornire și se vizitează toate vârfurile adiacente cu acesta nevizitate încă, și așa mai departe pentru celelalte vârfuri, cât timp este posibil.

Exercițiul 3:

Pentru graful din Figura 1 determinați ordinea de parcurgere a nodurilor cu metoda BF, când se pleacă din vârful 1 și apoi din vârful 5.

b) Metoda de parcurgere “în adâncime” (DF): se alege vârful de pornire, apoi pentru acesta se alege primul vecin al său nevizitat. Pentru acest vecin se caută apoi primul vecin al său nevizitat și așa mai departe. În cazul în care un vârf nu mai are vecini nevizitați, atunci ne întoarcem la vârful anterior, iar pentru acel vârf căutam următorul vecin nevizitat al său.

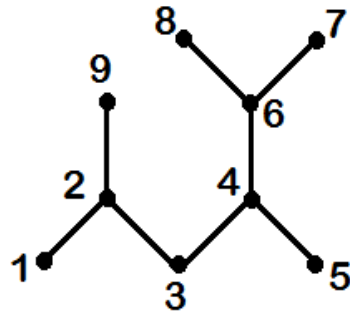
Exercițiul 4:

Pentru graful din Figura 1 determinați ordinea de parcurgere a nodurilor cu metoda DF, când se pleacă din vârful 1 și apoi din vârful 5.



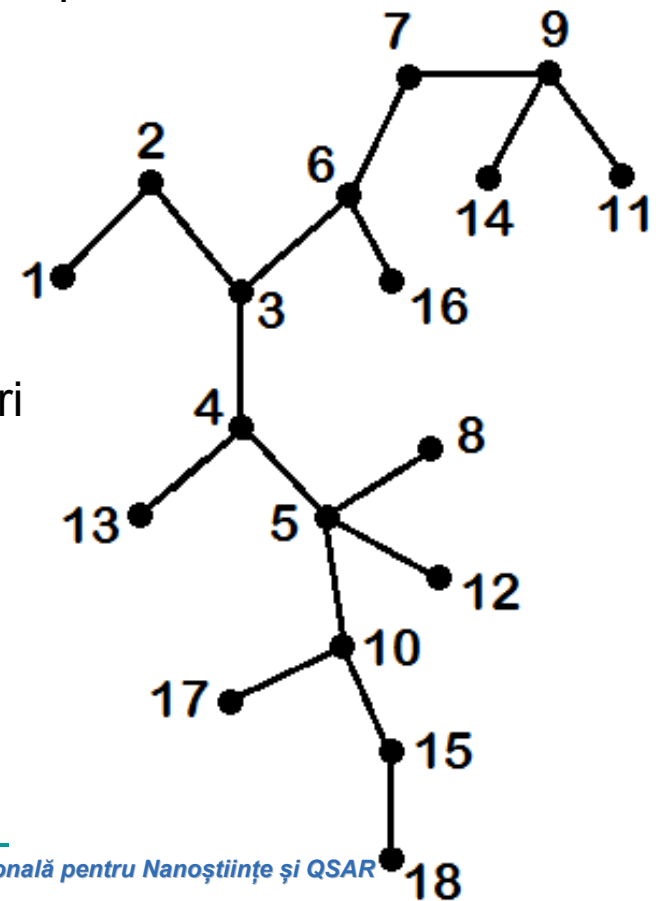
Temă

1. Se dă graful:



Scrieți succesiunea de vârfuri parcurse cu metoda BF pornind de la vârful 3, și cu metoda DF pornind de la vârful 6.

2. Pentru următorul graf, scrieți succesiunea de vârfuri parcurse cu metoda BF și DF pornind de la vârfurile 3, 4, 5, 6, 7, 9 și 10.



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel: +40-256-592638, Fax: +40-256-592620

mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro

BIBLIOGRAFIE

1. N. Trinajstić, The Characteristic Polynomial of a Graph, in *Chemical Graph Theory*, Vol I, CRC Press, Florida, 1983, pp.47-62
2. M.V. Diudea, I. Gutman, J. Lorentz, *Molecular Topology*, Nova Science, New York, 2001
3. M.V. Diudea, O. Ivanciuc, *Topologie moleculară*, Complex, Cluj-Napoca, 1995
4. N. Trinajstić, Enumeration of Kekulé Valence Structures, in *Chemical Graph Theory*, Second Edition, CRC Press, 1992, pp. 161-198
5. I. Gutman, M. Milun, Trinajstić, Topological Definition of Delocalisation Energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **1** (1975) 171-175
6. I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, Graph theory and molecular orbitals. 19. Nonparametric resonance energies of arbitrary conjugated systems, *J. Am. Chem. Soc.* **99** (1977) 1692-1704



Laboratorul de Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR

Str. Pestalozzi NO. 16, RO-300115, Timișoara

Tel:+40-256-592638, Fax: +40-256-592620

mv_putz@yahoo.com, mvputz@cbg.uvt.ro, www.mvputz.iqstorm.ro