Gráficas químicas

Ramón Espinosa Armenta
Profesor del Departamento Académico de Matemáticas del ITAM

Ilan Jinich Fainsod
Estudiante de Actuaría y Matemáticas Aplicadas del ITAM

Adrián Tame Jacobo
Estudiante Matemáticas Aplicadas del ITAM

Introducción

El estudio de gráficas comienza cuando Leonhard Euler publica *"Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis"* en 1736 en el cual se discute si es posible cruzar todos los puentes sobre el río Pregel de la ciudad de Königsberg (hoy Kaliningrado). Eventualmente, los estudios de Euler sobre los vértices y las aristas de un gráfica fueron generalizados por Augustin-Louis Cauchy y Simon Antoine Jean L'Huilier y son conocidos hoy como la base de la topología.

Otro matemático y científico importante en el desarrollo de la teoría de gráficas y especialmente sus aplicaciones a la química fue Arthur Cayley, quien estaba interesado más que nada en una clase de gráficas que hoy llamamos árboles. Las implicaciones que tuvieron sus estudios fueron fundamentales para el avance de la química teórica, y la relevancia de la teoría de gráficas en varias áreas.

Hoy en día, el estudio de la teoría de gráficas químicas es de gran interés para la comunidad científica.

El propósito de este artículo es utilizar conceptos de teoría de gráficas para definir estructuras químicas y sus propiedades. También se demostrarán resultados relacionados con propiedades importantes de las estructuras.

Gráficas

Definición. *Una gráfica es una pareja $G = (V, E)$ donde V es un conjunto finito no vacío cuyos elementos se llaman vértices y E es un conjunto cuyos elementos son subconjuntos de cardinalidad 2 de vértices cuyos elementos se llaman aristas.*

Definición. *La matriz de incidencia de G es la matriz $M = (M_{ik}), i = 1, ..., |V|; k = 1, ..., |E|$ donde*

$$M_{ik} = \begin{cases} 1 & \textit{si } e_k \textit{ incide en } i \\ 0 & \textit{en otro caso} \end{cases}$$

0.1234567891011121314151617181920212223242526272829303132333435363738394041

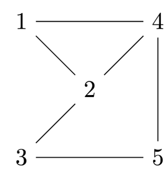

Figura 1: Ejemplo de una gráfica.

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Figura 2: Matriz de la gráfica en la Figura 1.

Definición. *El grado de un vértice $v \in V$ es el número de aristas que inciden en v, se denota $d(v)$.*

Una conclusión inmediata de esto es:

$$d(i) = \sum_{k=1}^{|E|} m_{ik}$$

Teorema. *Primer teorema de teoría de gráficas*
Si G es una gráfica Entonces:

$$\sum_{i \in V} d(i) = 2|E|$$

Demostración. Dado que cada arista e_k coincide en exactamente 2 vértices, se tiene que:

$$\sum_{i=1}^{|V|} m_{ik} = 2$$

Se sigue que:

$$\sum_{i \in V} d(i) = \sum_{i=1}^{|V|} \sum_{k=1}^{|E|} m_{ik} = \sum_{k=1}^{|E|} \sum_{i=1}^{|V|} m_{ik} = \sum_{k=1}^{|E|} 2m_{ik} = 2|E|$$

//

Definición. *Un camino es una sucesión finita de vértices, aristas, de forma alternada:*

$$w = (v_1, e_1, v_2, e_2, ..., e_{k-1}, vk)$$

Donde:

$$e_i = v_i v_{i+1}$$

Se acostumbra describir un camino por la sucesión de vértices.

Definición. *Una trayectoria es un camino donde no se repiten aristas y vértices.*

Definición. *Un ciclo es un camino donde no se repiten aristas, su origen y destino coinciden y además su origen y vértices internos son distintos.*

Definición. *Una gráfica es conexa si para toda pareja de vértices en la gráfica existe una trayectoria.*

Definición. *Un árbol es una gráfica acíclica (no contiene ningún ciclo) y conexa.*

Teorema. *Si T en un árbol con más de dos vértices entonces debe tener al menos dos vértices de grado 1.*

Demostración. Sea P una trayectoria maximal (No está contenida en ninguna otra trayectoria), donde $v_i, i = 1, ..., k$ son los vértices de la trayectoria.
Supongamos $d(v_i) > 1$ *para toda* i.
Sabemos que v_2 es vecino v_1 y además sabemos que v_1 no es vecino de ningún vértice v_i con $i \geq 3$ en P.

$$Por\ lo\ tanto\ existe\ w \in V\ tal\ que\ wv_1 \in E$$

$$Entonces\ P \subset P + w$$

Por lo tanto P no es maximal, lo cual contradice la hipótesis de que P es maximal.
Es análogo para v_k. //

Teorema. *Si T es un árbol entonces:*

$$|E| = |V| - 1$$

Demostración. Por inducción sobre $n = |V|$
Si n=1, T es un árbol trivial (solo tiene un vértice) entonces $|E(T)| = 0 = 1 - 1$
Supongamos el teorema cierto para cualquier árbol con n vértices.
Sea T un árbol con n+1 vértices.
Sea v un vértice de grado 1 en T.

$$Por\ lo\ tanto\ \hat{T} = T - v\ es\ un\ árbol\ con\ n\ vértices$$

Por hipótesis $|E(\hat{T})| = n - 1$

$$Por\ lo\ tanto\ |E(T)| = |E(\hat{T})| + 1 = n = |V(T)| - 1$$

//

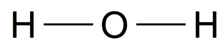

Figura 3: Diagrama Estructural de H_2O (Alexander Brown, 1864).

Un Poco de Química

Una molécula química consta de un conjunto finito de átomos unidos por medio de enlaces químicos. Por ejemplo H_2O.
Una fórmula o diagrama estructural es una representación gráfica de la composición de una molécula, que muestra la distribución espacial de los átomos. Una importante diferencia entre un diagrama estructural y una fórmula química estándar es que existen varias moléculas (como la de butano e isobutano) que aunque tienen la misma fórmula, sus vínculos son diferentes.

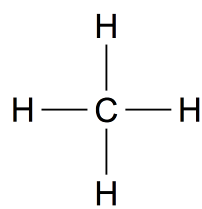

Figura 4: Diagrama Estructural del Metano

La fórmula estructural tiene diferentes representaciones, entre ellas las fórmulas semidesarrolladas, diagramas de Lewis, pero para los propósitos de este artículo utilizaremos el formato línea-ángulo estándar.
Los isómeros químicos son moléculas que tienen la misma fórmula química pero distintas propiedades.
Un isómero químico pertenece a la familia de los alcanos si satisface que:

1. Todo átomo es un átomo de carbono o de hidrógeno.

2. Todo átomo de carbono tienen valencia (grado) 4 y todo átomo de hidrógeno tiene valencia 1.

3. El diagrama estructural es acíclico y conexo (i.e. es un árbol).

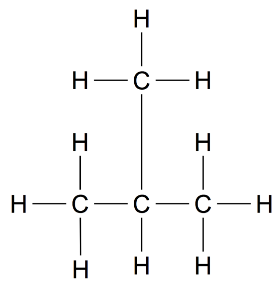

Figura 5: Diagrama Estructural del isobutano

Gráficas Químicas

Teorema. *(Cayley) Si una molécula de la forma C_rH_s es un alcano, entonces $s = 2r + 2$*

Demostración. Sea G=(V,E) la gráfica que representa el diagrama estructural de C_rH_s. Separamos el conjunto de vértices en carbonos e hidrógenos, de la siguiente manera:

$$V = C \cup H$$

Donde C es el conjunto de vértices que son carbonos y H es el de hidrógenos.
Como un vértice no puede ser carbono e hidrógeno al mismo tiempo, se tiene que:

$$C \cap H = \varnothing$$

Por hipótesis:

$$|C| = r$$

$$|H| = s$$

Si n es la cardinalidad de V se tiene que:

$$n = |V| = r + s$$

Como la gráfica es un árbol, entonces:

$$|E| = n - 1 = r + s - 1$$

Por otra parte,

$$\sum_{v \in V} d(v) = \sum_{v \in C} d(v) + \sum_{v \in H} d(v) = 4r + s$$

0.12345678910111213141516171819202122232425262728293031323334353637383940041

También,

$$\sum_{v \in V} d(v) = 2|E| = 2r + 2s - 2$$

Por lo tanto $4r + s = 2r + 2s - 2$ *entonces* $2r + 2 = s$.

//

Comentarios Finales

Teoría de gráficas es un tema extremadamente amplio que puede abarcar varios aspectos de la vida cotidiana y cuenta con una gran variedad de aplicaciones, como en este caso la química.

Si al lector le interesa el tema, recomendamos consultar el libro de *"Introduction to Graph Theory"* de Douglas D. West[3] y el articulo de *"Contando Árboles Filogenético"* de Ramón Espinosa Armenta[4].

Referencias

[1] "Graph Theory". 2016. Math.Fau.Edu. Accessed September 9 2016. http://math.fau.edu/locke/GRAPHTHE.HTM.

[2] Espinosa, R., "Contando árboles filogenéticos." *Laberintos e Infinitos* 38 (2015): 6-11.

[3] West, Douglas B. *Introduction to Graph Theory*, Pearson, 2001.

[4] Espinosa, R., *Matemáticas Discretas*, Editorial Alfaomega, 2010.

[5] N.L. Biggs, E.K. Lloyd and R.J. Wilson. *Graph Theory 1736-1936.* Clarendon Press, Oxford, 1976.

[6] Brown, A. C. "On the Theory of Isometric Compounds." *Transactions of the Royal Society of Edinburough* 23 (1864): 707-719

[7] Cayley, A. "On the Mathematical Theory of Isomers." *Philosophical Magazine (4)* 47 (1874): 444-446

[8] Sylvester, J. J. "Chemistry and Algebra" *Nature* 17 (1877): 284