**UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI**

**FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ**

**INDICI TOPOLOGICI**

**Rezumat**

În cadrul acestei lucrări de licență am aprofundat studiul indicilor topologici, domeniu

aflat la intersecția între chimia matematică și teoria grafurilor. Intenția a fost ca, în urma unui studiu aprofundat cu privire la anumiți descriptori matematici ce indică gradul de ramificare a unui graf , să rezulte o prezentare organizată a unor rezultate semnificative din domeniu, aducând propriile contribuții în demonstrarea detaliată a rezultatelor. Pe parcursul lucrarii au fost folosite tehnici noi ce nu fac obiectul cursurilor de baza de teoria grafurilor.

În prezent sunt creați și incluși în modele din ce în ce mai mulți indici topologici

care încearcă să ofere soluții cât mai bune pentru a soluționa probleme variate precum

distingerea între izomerii unei substanțe date, prezicerea gradului de toxicitate pentru

o anumită substanță, găsirea unor medicamente eficace împotriva unor boli grave

precum HIV sau tipuri de cancer care sunt generate de viruși, crearea de materiale

rezistente la anumiți factori de mediu ce sunt folosite în armată sau industrie.

Un rol esențial în studiul indicilor topologici îl au chimisții Ivan Gutman și Milan Randić, ale căror studii au avut la bază ideea de a studia ramificarea unui graf, rezultând o serie de cercetări de referință pentru chimia computațională.

În literatura de specialitate, noțiunea de indice topologic generează noi studii, motivația fiind că un nou indice topologic poate modela proprietățiile unor substanțe deja cunoscute sau obținerea unor noi compuși care să aibă anumite proprietăți.

Vor fi prezentate rezultate despre o serie de indici topologici ce caracterizează anumite

proprietăți fizico-chimice ale unor substanțe esențiale în chimia organică.

Clasificarea indicilor topologici se realizează în principiu în funcție de contribuția pe care o au aceștia în chimia moleculară, având un rol important în construirea modelelor Quantitative

Structure-Activity Relationship (QSAR) sau Quantitative Structure-Property

Relationship (QSPR), utilizate pentru a furniza predicții despre proprietățile anumitor

compuși chimici. Spre exemplificare, putem menționa un model QSAR format din 13

indici topologici ce are drept scop crearea unui nou imunosupresor. Modelul a fost

folosit pentru a extrage dintr-o bază de date foarte variată de compuși chimici numai

5 dintre aceștia, care au fost sintetizați și testați clinic. Unul dintre acești compuși s-a dovedit a fi de 100 de ori mai bun decât orice imunosupresor existent pe piată.

Avantajul utilizării unui astfel de model a fost acela că selecția celor 5 substanțe -

candidat s-a realizat teoretic, prin calcul, evitându-se astfel costurile imense implicate

în sintetizarea tuturor substanțelor din baza de date, la care se adaugă imposibilitatea

de a testa clinic un număr atât de mare de compuși chimici.

Printre primii indici topologici introduși se numără indicele creat de chimistul Harry

Wiener, ce are un rol important în descrierea dependenței reciproce între punctele de

fierbere ale moleculelor hidrocarburilor saturate și nesaturate. Indicele Wiener a fost

folosit și în cromatografia de gaze, ce reprezintă o metodă folosită în chimie pentru

izolarea și descrierea unor substanțe care pot fi volatilizate fără descompunere sau

pentru testarea purității unor substanțe.

În cadrul primelor capitole, am oferit cititorului instrumentele necesare parcurgerii

lucrării.

În cadrul celui de al treilea capitol, am analizat o serie de indici topologici importanți

din punct de vedere al apariției lor, dar și datorită rolului acestora în domeniul chimiei

organice. De asemenea, am menționat o serie de exemple și de utilizării ale fiecărui

indice în parte pentru a evidenția rolul și importanța acestora în numeroase domenii.

Capitolul trei prezintă valoarea fiecărui indice în raport cu anumiți indicatori ai

unui graf: ordin, număr de muchii, grade sau diametru. De asemenea, sunt prezentate

grafurile extremale pentru cele mai întâlnite clase de grafuri în domeniul chimiei

matematice: arborii și grafurile uniciclice.

În cadrul capitolui patru, remarcăm indicele Randić, deoarece a fost supus unei

expertize mult mai dezvoltate decât alți indici. Acesta a avut un rol esențial în ceea

ce privește modele QSAR/QSPR.

De asemenea, am observat că anumiți indici topologici au anumite similarități

în relațiile matematice care îi descriu și în ceea ce privește graful maximal asociat.

Capitolul cinci prezintă o serie de relații matematice între cei mai importanți indici,

ce se transpun în domeniul chimiei organice în legături între valori ale indicilor și

proprietăți fizico-chimice ale compușilor pentru care sunt utilizați respectivii indici.

În urma redactării acestei lucrări, pot afirma cu certitudine că acesta este doar

un început în studiul temei, un pas următor l-ar putea constitui analiza altor indici

importanți, precum indicele de conectivitate atomică creat și studiat de Ernesto Estrada,

Torres Luis, Lissette Rodriguez și Ivan Gutman, indicele Balaban, creat de A.T. Balaban și indicele Narumi-Katayama, creat de H. Narumi, M. Katayama. Lucrarea ar putea fi completată prin adăugarea analizei indicelui de conectivitate atomică

cu privire la grafurile cacti, indicelui Balaban index cu privire la grafurile regulate și

a indicelui Narumi-Katayama cu privire la produsul de grafuri de spini.

În concluzie, scopul propus de aceasta lucrare a fost în principal de a arăta și

demonstra rezultate privind tematica dată, dar și de a aduce la cunoștință impactul

indicilor topologici în industrie.