

# Resonančni grafi nekaterih dvodelnih zunajravninskih grafov in posplošena metoda prerezov

Simon Brezovnik  
Fakulteta za strojništvo, Ljubljana, Slovenija

`simon.brezovnik@fs.uni-lj.si`

*Seminar za geometrijsko topologijo, 22.2.2023*

## **Povzetek**

Katakondenziran sodi obročni sistem (CERS) predstavlja matematični model, ki opisuje številne kemijske strukture, med njimi npr. benzenoidne sisteme in fenilene. V predstavitvi se bomo dotaknili resonančnih grafov CERS-ov in njihove povezave z marjetičnimi kockami. Predstavljen bo algoritem za binarno kodiranje popolnih prirejanj CERS-a, ki omogoča konstrukcijo njegovega resonančnega grafa. Nadalje predstavimo rezultate v povezavi s CERS-i, ki imajo izomorfne resonančne grafe. Dobljeni rezultati so bili uporabljeni na fenilenih, raziskana je bila tudi povezava med njihovimi resonančnimi grafi ter resonančnimi grafi katakondenziranih benzenoidnih grafov. Podana bo karakterizacija tistih CERS-ov, katerih resonančni grafi so marjetične kocke.

V drugem delu predstavitve se bomo dotaknili topoloških indeksov oz. molekularnih deskriptorjev. Predstavljena bo posplošena metoda prerezov, ki omogoča izračun različnih topoloških indeksov (natančneje Wienerjevega indeksa dvojno vozliščno-uteženega grafa, Schultzevega indeksa ter indeksov tipa Szeged). Pojasnjena bo na novo izpeljana formula za izračun indeksov tipa Szeged za poljuben krepko uteženi graf. Nazadnje bo podanih še nekaj zgledov uporabe izpeljane metode za različne molekularne grafe. Poleg naštetega bo predstavljen nov model, ki obravnava korelacijo med vrelišči alkenov in alkadienov ter povezavno-uteženimi Wienerjevimi indeksi.

Skupno delo z Nikotom Tratnikom, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Slovenija in Petro Žigert Pleteršek, Univerza v Mariboru, Fakulteta za kemijo in kemijsko inženirstvo, Slovenija.