PROPUESTA DE TRABAJO DE FIN DE GRADO
Curso académico 2025-26

Titulación TFG: Grado en Matemáticas

Título del trabajo: Problemas extremales en índices topológicos.

Metodología: Un descriptor topológico es un número que representa una estructura química a través del grafo molecular. Un descriptor topológico se llama índice topológico si se correlaciona con una propiedad molecular. Los índices topológicos se usan para estudiar las propiedades fisico-químicas de los compuestos químicos ya que capturan algunas propiedades en un simple número.

Veremos algunas estrategias para definir estos índices y estudiaremos problemas extremales sobre os grafos para caracterizar las cotas máximas y mínimas de estos índices. La utilidad de dichas cotas es que permiten predecir las correspondientes cotas sobre la propiedad molecular asociada.

Referencias:

[1] I. Gutman, B. Ruŝĉić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes, J. Chem. Phys. 62 (1975) 3399_3405.

[2] I. Gutman, N. Trinajstić, Graph theory and molecular orbitals. Total π-electron energy of alternant hydrocarbons, Chem. Phys. Lett. 17 (1972) 535_538.

[3] A. Mili£evi¢, S. Nikoli¢, On variable Zagreb indices, Croat. Chem. Acta 77 (2004) 97_101.

Profesor/es: Álvaro Martínez Pérez

Requisitos: Nociones básicas de teoría de grafos.

Plazas: 2.

Modalidad: TFG Específico