NOTAS DE MATEMATICA

Nº 62

ALGEBRAS ASOCIADAS A UN P-GRAFO Y SUS APLICACIONES A UN MODELO MATEMATICO DE LA QUIMICA ESTRUCTURAL.

POR

OSWALDO ARAUJO

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE MATEMATICA

MERIDA-VENEZUELA

1984

ALGEBRAS ASOCIADAS A UN P-GRAFO Y SUS APLICACIONES A UN MODELO MATEMATICO DE LA QUIMICA ESTRUCTURAL.

OSWALDO ARAUJO G.

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMATICA
MERIDA-VENEZUELA

RESUMEN

En este trabajo estudiamos la asociatividad del álgebra asociada a un p-grafo G, con $p > 1$, con la finalidad de caracterizar los conjuntos moleculares que tienen estructura cíclica y electrones no enlazantes.

ON ALGEBRAS DERIVED FROM P-GRAPHS AND THEIR APPLICATIONS TO A MATHEMATICAL MODEL OF CONSTITUTIONAL CHEMISTRY.

ABSTRACT

This article is devoted to present a characterization of ensembles of molecules which have cyclic structure and free valence electrons for such purpose we study the associativity of the algebras derived from p-graphs G, with $p > 1$.

ALGEBRAS ASOCIADAS A UN P-GRAFO Y SUS APLICACIONES A UN MODELO MATEMATICO DE LA QUIMICA ESTRUCTURAL.

INTRODUCCION.

A todo p-grafo G le podemos asociar un álgebra. Esta álgebra, en general, no es asociativa ni conmutativa y no tiene elemento identidad.

Dugundgi y Ugi ([2]) han desarrollado un modelo que permite matematizar los aspectos esteoquiométricos de una familia de conjuntos moleculares isómeros. Su punto de vista es el siguiente: fijado un conjunto finito de átomos A se define un *conjunto molecular* de A (EM(A)) como un compuesto químico cualquiera o una colección de especies químicas formadas a partir de A utilizando cada átomo de A una sola vez y una *familia de conjuntos moleculares isómeros de* A (FEMI(A)) como el conjunto de todos los EM(A). Por ejemplo, si $A = \{H^1, H^2, H^3, H^4, H^5, H^6, C^1, C^2, O\}$ tenemos, entre otros, los siguientes EM(A):

$EM_o(A) = \{2\ C + 6\ H + O\}$, $EM_1(A) = \{C\ H_3 - C\ H_2 - O\ H\}$,

$EM_2(A) = \{C\ H_3 - O - C\ H_3\}$, $EM_3(A) = \{C\ H_3 - C\ H\ O + H_2\}$

$EM_4(A) = \{C\ H_4 + C\ H_2 = O\}$, $EM_5(A) = \{H\ C \equiv C\ H + H_2\ O + H_2\}$.

En este caso, $FEMI(A) = \{EM_o(A), \ldots, EM_5(A), \ldots, EM_\nu(A)\}$.

El hecho de fijar un conjunto finito de átomos A y de considerar todos los conjuntos moleculares que se puedan construir con los elementos a $\in A$ les permite representar los conjuntos moleculares por matrices simétricas con coeficientes enteros no negativos (be-matrices) y las transformaciones químicas por matrices simétricas con coeficientes enteros (matrices de reacción). Por ejemplo, el conjunto molecular $H - C \equiv N$: puede ser representado por la be-matriz

$$B = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{array}{c} H \\ C \\ N \end{array} \\ \begin{array}{ccc} H & C & N \end{array} \end{array}$$

y la reacción $H - C \equiv N: \longrightarrow H - N \equiv C:$ es representada por la matriz de reacción

$$R = E - B = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{array}{c} H \\ C \\ N \end{array} \\ \begin{array}{ccc} H & C & N \end{array} \end{array}$$

donde

$$E = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{c} H \\ C \\ N \end{array} \\ \begin{array}{ccc} H & C & N \end{array} \end{array}$$

y

$$B = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{array}{c} H \\ C \\ N \end{array} \\ \begin{array}{ccc} H & C & N \end{array} \end{array}$$

Por otro lado, Dugundji y otros ([3]) han señalado la conexión entre pseudo-grafos (p-grafos) y be-matrices.

En este artículo caracterizamos los conjuntos moleculares que tienen estructura cíclica y electrones no enlazantes. Dicha caracterización se logra al establecer condiciones que permiten determinar cuando el álgebra asociada a un p-grafo, con $p > 1$, es asociativa.

1. GENERALIDADES SOBRE P-GRAFOS.

Un p-*grafo* es un par (S,Δ) donde S es un conjunto y $\Delta: S\times S \to \{0,1,\ldots,p\}$ es una aplicación de conjuntos donde P es un entero no negativo. Los elementos de S son llamados los *vértices* de G y las *aristas* de G son los pares ordenados $(r,s) \in S\times S$ tales que $\Delta(r,s) = q$ $(0 \leq q \leq p)$. Un p-grafo es denominado *con lazos* cuando $\Delta(r,r) \neq 0$ para todo $r \in S$.

Cuando $\Delta(r,s) = \Delta(s,r)$ para todo $r,s \in S$, el p-grafo es *simétrico*.

Sea $G = (S,\Delta)$ un p-grafo y sean $r,s \in S$. Decimos que s es *alcanzable* a partir de r si existen $r = r_1, r_2,\ldots,r_n = s$ tales $\Delta(r_i,r_{i+1}) \neq 0$ $(i=1,\ldots,n-1)$. En este caso la sucesión $r_1,\ldots,r_u$ es llamada un *camino* que une r a s. La relación definida arriba es reflexiva y transitiva, denotada $r \leq s$. La relación $r \sim s \iff r \leq s$ y $s \leq r$ es de equivalencia. Las clases de equivalencias son las *componentes fuertemente conexas de* G. Si solo hay una clase diremos que G es *fuertemente conexo*. En el caso de grafos simétricos, la relación $r \leq s$ es de equivalencia y en este caso diremos *componente conexa y conexo.*

Sea $G = (S,\Delta)$ un p-grafo y S' un sub-conjunto de S. Se dice que $G' = (S',\Delta)$ es un *sub-grafo* de G generado por S' si G' es un p-grafo.

A todo p-grafo $G=(S,\Delta)$ le asociamos una matriz $(\Delta(r,s))_{(r,s)\in S\times S}$, denominada *matriz asociada a* G. Si S es un conjunto finito con n elementos, $\Delta(r,s)_{(r,s)\in S\times S}$ es una matriz cuadra n x n.

Sea $C = (c_{ij})$ una matriz cuadrada nxn con coeficientes enteros no negativos y consideremos el conjunto $S = \{s_1,\dots,s_n\}$. El par $G(C)=(S,\Delta)$ donde $\Delta\colon S\times S \to \{0,1,\dots,p\}$ es definida por $\Delta(s_i,s_j) = c_{ij}$, es un p-grafo. Así, a toda matriz cuadrada C, nxn le asociamos un p-grafo G(C).

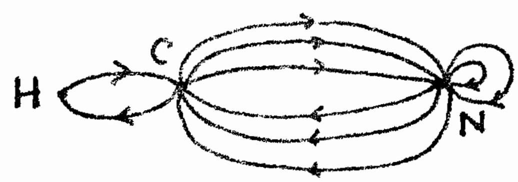
En consecuencia, *existe una biyección entre el conjunto de los p-grafos simétricos y el conjunto de las matrices cuadradas simétricas.*

Como toda be-matriz $B=(b_{ij})$ es una matriz cuadrada simétrica, le podemos asociar un p-grafo simétrico G(B). En este caso los vértices son los átomos del conjunto molecular representado por B y las aristas $\Delta(s_i,s_j) = b_{ij}$ representan los enlaces entre los átomos s_i y s_j.

En particular, un lazo $\Delta(s_i,s_i) = b_{ii}$ representa un electron externo libre del átomo s_i. Por ejemplo, la be-matriz

$$B = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \\ \begin{matrix} H & C & N \end{matrix} \end{array} \begin{matrix} H \\ C \\ N \\ \end{matrix}$$

que representa el conjunto molecular $H - C \equiv N$: le asociamos el 3-grafo simétrico G(B):



2. ALGEBRAS ASOCIADAS A UN P-GRAFO.

Sean $G = (S,\Delta)$ un p-grafo, K un anillo conmutativo con unidad y $(e_{rs})_{(r,s)\varepsilon S\times S}$ la base canónica del K-módulo libre $K^{(S\times S)}$. Definimos sobre K una estructura de K-álgebra por:

$$e_{qr}\, e_{st} = \delta_{rs}\, \sup(\Delta(q,r),\ \Delta(s,t))e_{qt},$$

para todo q,r,s,t en S, donde δ_{rs} es la delta de Kronecker.

Se obtiene así sobre $K^{(S\times S)}$ una estructura de K-álgebra, denominada, *álgebra asociada al p-grafo* G y se denota $L_K(G) = K^{(S\times S)}$. En general, $L_K(G)$ no es conmutativa, ni asociativa y no tiene elemento identidad.

Costa y Micali ([1]) han demostrado la siguiente proposición:

PROPOSICION 2.1. *Sea* $G = (S,\Delta)$ *un 1-grafo conexo y simétrico, con* $n = \text{card } S \geq 2$. *Las siguientes condiciones son equivalentes:*

i) *Para todo* $r,s,q \in S$ *tales que* $\Delta(r,s) = \Delta(s,q) = 1$, *entonces* $\Delta(r,q) = 1$.

ii) $\Delta(r,s) = 1$ *para todo* r,s *en* S.

iii) *Existe un isomorfismo de K-álgebras* $L_K(G) \xrightarrow{\sim} M_n(K)$.

iv) $L_K(G)$ *es un K-álgebra asociativa.*

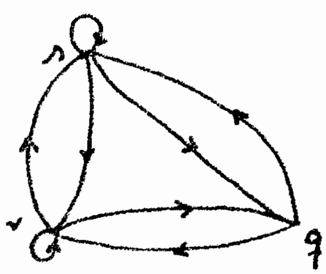
COROLARIO 2.1.1. *Sea* $G = (S,\Delta)$ *un 1-grafo conexo y simétrico y supongamos que* S *sea un conjunto finto con* n *elemento,* $n \geq 2$. *Sea* S' *un* *sub-conjunto de* S *tal que* card(S') $\neq$ 1. *Si el sub-1-grafo* G' *de* G, *generado por* S', *es un 1-grafo completo con lazos; entonces* $L_K(G')$ *es un K-álgebra asociativa.*

Esto es una consecuencia del hecho de ser G' un 1-grafo completo con lazos.

La proposición 2.1 nos dice que si G es un 1-grafo completo con lazos, entonces $L_K(G)$ es un K-álgebra asociativa. Los ejemplos que damos a continuación nos muestran que si G es un 1-grafo completo pero no con lazos o si G es un 1-grafo con lazos pero no completo, entonces $L_K(G)$ no es asociativa

EJEMPLO 2.2.

i) Sea G el 1-grafo;



entonces

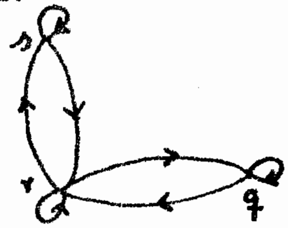
$$(e_{qs}\, e_{sq})\, e_{qq} = e_{qq}\, e_{qq} = 0$$

y

$$e_{qs}(e_{sq}\, e_{qq}) = e_{qs}\, e_{sq} = e_{qq}.$$

Luego, $L_K(G)$ no es asociativa.

ii) Sea G el 1-grafo;

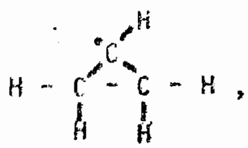


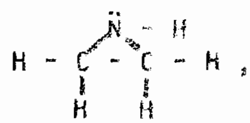
entonces

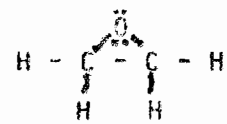
$$(e_{qr}\ e_{rs})\ e_{sq} = e_{qs}\ e_{sq} = 0 \neq e_{qr}(e_{rs}\ e_{sq}) = e_{qr}\ e_{rq} = e_{qq}$$

y, por tanto, $L_K(G)$ no es asociativa.

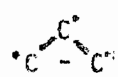
Estos ejemplos nos muestran que el álgebra asociada al 1-grafo de los siguientes conjuntos moleculares:



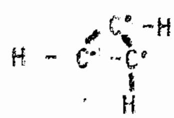




no es asociativa. En cambio, el álgebra asociada al sub-1-grupo



del conjunto molecular



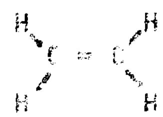
es asociativa.

LEMA 2.3. *Sea* $G = (S,\Delta)$ *un* p*-grafo conexo y simétrico y supongamos que* S *sea un conjunto finito con* n *elementos,* $n \geq 2$. *Si existe un vértice* $q \in S$ *tal que* $\Delta(q,q) = 0$, *entonces* $L_K(G)$ *no es asociativa.*

Basta con ver que $(e_{qs}\ e_{sq})\ e_{qq} = e_{qq}\ e_{qq} = 0$ y que

$$e_{qs}(e_{sq}\ e_{qq}) = e_{qs}\ e_{sq} = e_{qq}.$$

EJEMPLO 2.4. El álgebra asociada al grafo de los conjuntos moleculares



y

no es asociativa.

Según 2.2 y 2.3 vemos que, en general, si G es un p-grafo conexo y simétrico el hecho de tener ciclos o pseudo-ciclos no implica la asociatividad de $L_K(G)$. Por otro lado, la existencia de conjuntos moleculares con una parte (sub-p-grafos) cíclica nos lleva a buscar resultados donde podamos encontrar relaciones entre la ciclicidad y la asociatividad del álgebra asociada a un p-grafo conexo y simétrico.

En todo lo que sigue S es un conjunto finito con n elementos, $n \geq 2$, y K es un anillo conmutativo con elemento identidad.

LEMA 2.5. *Sea* K *un* $\mathbb{Z}$*-módulo sin torsión,* $G = (S,\Delta)$ *un p-grafo simétrico y supongamos que* $\Delta(r,s) = 1$ *para todo* $r,s \in S$, $r \neq s$ *y* $\Delta(u,u) = \rho_u$ $(1 \leq \rho_u \leq p)$ *para todo* $u \in S$. *Entonces* $L_K(G)$ *es un* K*-álgebra asociativa.*

Inicialmente verificamos que la aplicación $\alpha: L_K(G) \longrightarrow M_n(K)$ definida por $\alpha(e_{rs}) = E_{rs}$ y $\alpha(e_{uu}) = \rho_u E_{uu}$ es un homomorfismo de

K-álgebras, donde E_{rs} es la matriz n x n que tiene 1 en la intersección de la r-ésima columna con la s-ésima fila y o en el resto. Para esto, es suficiente con demostrar que α es un homomorfismo para los elementos de la base de $L_K(G)$ donde aparece e_{uu}. Esto es, productos de la forma $e_{ru}\, e_{uu}$, $e_{uu}\, e_{ur}$ y $e_{uu}\, e_{uu}$. En efecto, $\alpha(e_{ru}\, e_{uu}) = \alpha(\rho_u\, e_{ru}) =$ $= \rho_u\, E_{ru} = \rho_u\, E_{ru}\, E_{uu} = \alpha(e_{ru})\, \alpha(e_{uu})$.

Análogamente, $\alpha(e_{uu}\, e_{ur}) = \alpha(e_{uu})\, \alpha(e_{ur})$. Finalmente, $\alpha(e_{uu}\, e_{uu}) =$ $= \alpha(\rho_u\, e_{uu}) = \rho_u^2\, E_{uu} = \rho_u^2\, E_{uu}\, E_{uu} = \rho_u\, E_{uu}\, \rho_u\, E_{uu} = \alpha(e_{uu})\, \alpha(e_{uu})$.

Por otro lado, si $\alpha(\sum_{r,s} \lambda_{rs}\, e_{rs}) = 0$, se tiene $\sum_{r\neq s} \lambda_{rs}\, E_{rs}$ + $+ \sum_{r} \lambda_{rr}\, E_{rr} = 0$, lo que implica $\lambda_{rs} = 0$, si $r \neq s$, y $\lambda_{rr} = 0$. Como K es un Z-módulo sin torsión tenemos $\lambda_{rr} = 0$ para todo $r \in S$ y en consecuencia α es un morfismo inyectivo de K-álgebra y $L_K(G)$ es una K-álgebra asociativa.

PROPOSICION 2.6. *Sea* K *un* Z-*módulo sin torsión. Sea* $G = (S,\Delta)$ *un* p-*grafo conexo y simétrico y supongamos* $\Delta(u,u) = \rho_u (1 \leq \rho_u \leq p)$ *para todo* $u \in S$. *Las siguientes condiciones son equivalentes:*

(i) *Para todo* $r,s,q \in S$ *distintos tales que* $\Delta(r,s) = \Delta(s,q) = 1$, *entonces* $\Delta(r,q) = 1$.

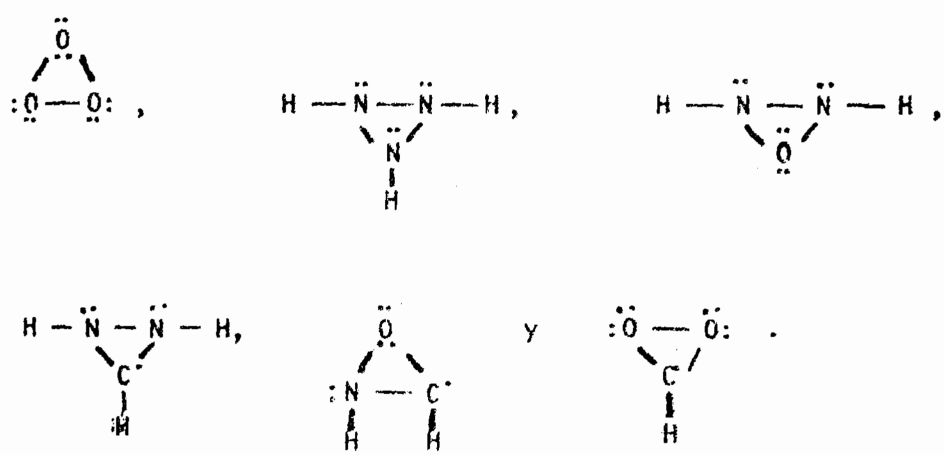
(ii) $\Delta(r,s) = 1$, *para todo* $r,s \in S$, $r \neq s$.

(iii) *Existe un monomorfismo de* K-*álgebra* $L_K(G) \longrightarrow M_n(K)$.

(iv) $L_K(G)$ *es un* K-*álgebra asociativa*.

Como G es conexo y simétrico necesariamente (i) $\Rightarrow$(ii). Por 2.5, (ii) $\Rightarrow$(iii) y es claro que (iii) $\Rightarrow$(iv). Supongamos que no se verifique (i), esto es, que existan $r,s,q \in S$ tales que $\Delta(r,s) = \Delta(s,q)=1$ y $\Delta(r,q) = 0$. Entonces $(e_{rq}\, e_{qr})\, e_{rs} \neq e_{rq}\, (e_{qr}\, e_{rs})$ lo que muestra que (iv) $\Rightarrow$(i).

EJEMPLO 2.7. Sea G' el sub-p-grafo que representa la parte cíclica de los conjuntos moleculares:



Entonces, $L_Z(G')$ es un Z-álgebra asociativa.

LEMA 2.8. *Sean* K *un* Z-*módulo sin torsión y* $G = (S,\Delta)$ *un* p-*grafo simétrico. Si* $\Delta(r,s) = c$ $(1 \leq c \leq p)$ *para todo* $r,s \in S$, *entonces* $L_K(G)$ *es un* K-*álgebra asociativa.*

Es fácil de verificar que la aplicación $\alpha_c: L_K(G) \longrightarrow M_n(K)$ definida por $\alpha_c(e_{rs}) = c\, E_{rs}$ es un homomorfismo de K-álgebras, donde E_{rs} es la matriz n x n que tiene 1 en la intersección de la r-ésima columna con la s-ésima fila y o en el resto. Por otro lado, si

$\alpha_c(\sum_{r,s}\lambda_{rs}\, e_{rs}) = 0$, tenemos $\sum_{r,s}\lambda_{rs}\, c\, E_{rs} = 0$ y esto acarrea que $\lambda_{rs}c=0$ para todo $r,s \in S$. Como K es un Z-módulo sin torsión, $\lambda_{rs} = 0$, para todo $r,s \in S$. Por tanto, α_c es un monomorfismo de K-álgebras y $L_K(G)$ es un K-álgebra asociativa.

PROPOSICION 2.9. *Sean* K *un* Z*-módulo sin torsión y* $G = (S,\Delta)$ *un* p*-grafo conexo y simétrico. Las siguientes condiciones son equivalentes:*

(i) *Para todo* $r,s,q \in S$, *tales que* $\Delta(r,s) = \Delta(s,q) = c$ $(1 \leq c \leq p)$, *entonces* $\Delta(r,q) = c$.

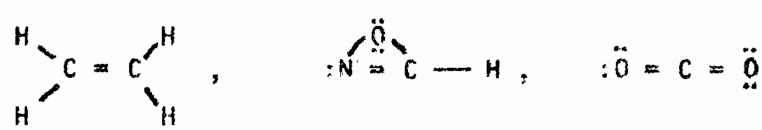
(ii) $\Delta(r,s) = c$, *para todo* $r,s \in S$.

(iii) *Existe un monoformismo de* K*-álgebras* $L_K(G) \longrightarrow M_n(K)$.

(iv) $L_K(G)$ *es un* K*-álgebra asociativa.*

La demostración es análoga a la prueba de 2.6 a excepción de (ii) $\Rightarrow$(iii) que es una consecuencia del lema 2.8.

EJEMPLO 2.10. El álgebra asociada al p-grafo de los conjuntos moleculares:



no es asociativa.

Ahora bien, para los siguientes conjuntos moleculares:

$:\ddot{O} = \ddot{O}:$ y $C^{\cdot} \equiv N:$

Supongamos que G sea el p-grafo que los representa ¿Qué podemos decir acerca de la asociatividad del álgebra asociada a G?.

Ninguno de los resultados hasta ahora verificados nos dan alguna información al respecto. Por causa de ello vamos a demostrar la siguiente proposición:

PROPOSICION 2.11. *Sea* $G = (S,\Delta)$ *un p-grafo conexo, simétrico y de orden dos. Las siguientes condiciones son equivalentes:*

(i) *Para todo* $r,s \in S$ *tales que* $\Delta(r,s) = c$ $(1 \leq c \leq p)$ *y* $\Delta(s,s) = \Delta(r,r) = c'$ $(1 \leq c' \leq p)$, *entonces* $c' \geq c$.

(ii) $L_K(G)$ *es un K-álgebra asociativa.*

Es claro que una base de $L_K(G)$ es $\{e_{rr}, e_{rs}, e_{sr}, e_{ss}\}$.

La tabla de multiplicación de $L_K(G)$ se escribe:

	e_{rr}	e_{rs}	e_{sr}	e_{ss}
e_{rr}	$c'e_{rr}$	$c'e_{rs}$	0	0
e_{rs}	0	0	$c\,e_{rr}$	$c'e_{rs}$
e_{sr}	$c'e_{sr}$	$c\,e_{ss}$	0	0
e_{ss}	0	0	$c'e_{sr}$	$c'e_{ss}$

Se puede verificar facilmente que, en general,

(a) $(e_{tq}\, e_{mn})\, e_{uv} = e_{tq}(e_{mn}\, e_{uv}) = 0$ si $q \neq m$ y $n \neq u$;

(b) $(e_{tq}\ e_{mn})\ e_{uv} = e_{tq}(e_{mn}\ e_{uv}) = 0$ si $q \neq m$ y $n = u$;

(c) $(e_{tq}\ e_{mn})\ e_{uv} = e_{tq}(e_{mn}\ e_{nv}) = 0$ si $q = m$ y $n \neq u$;

(d) $(e_{tq}\ e_{mn})\ e_{uv} = e_{tq}(e_{mn}\ e_{uv}) = 0$ si $t = q = m = n = u = v$.

Haciendo el cálculo tenemos, en nuestro caso, 16 casos para cada una de las situaciones (a),(b) y (c) y dos para (d). Por otro lado, usando la tabla, dada arriba, se puede verificar que en los 14 casos restantes tenemos asociatividad. Como hay 64 productos estos nos muestra que (i)⟶(ii).

Recíprocamente, supongamos que (i) no se verifique, esto es, que existen $r,s \in S$ tales que $\Delta(r,s) = c$ y $\Delta(r,s) = \Delta(s,s) = c'$, con $c' < c$. Como $(e_{rr}\ e_{rs})\ e_{sr} = c^2\ e_{rr}$ y $e_{rr}(e_{rs}\ r_{sr}) = e_{rr}\ c\ e_{rr} = c\ c'\ e_{rr}$, entonces $(e_{rr}\ e_{rs})\ e_{sr} \neq e_{rr}(e_{rs}\ e_{sr})$.

Por tanto, si G es el p-grafo que representa el conjunto molecular $:\ddot{O} = \ddot{Q}$, $L_Z(G)$ es un Z-álgebra asociativa y si G es el Z-grafo de orden dos que representa el conjunto molecular $\cdot C \equiv \dot{N}$, $L_Z(G)$ no es asociativa.

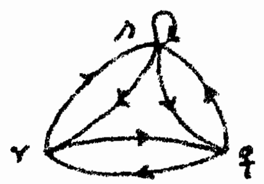
3. CONCLUSION E INTERPRETACION

En esta sección damos una interpretación de los resultados 2.1, 2.6 y 2.9 y estudiamos un tipo particular de p-grafo conexo y simétrico. Para ello sea K = Z y A un conjunto finito de átomos con n elementos ($n \geq 2$). Sea G un p-grafo completo y con lazos. Podemos traducir estas dos propiedades, en términos químicos, diciendo que G representa un conjunto molecular de FEMI(A) que tiene ciclos y electrones no enlazantes en todos sus vértices. Por consiguiente, las proposiciones 2.1, 2.6 y 2.9 nos llevan a concluir que *la ciclicidad de un p-grafo*

G *que representa un conjunto molecular de* FEMI(A), *más el hecho de tener éste conjunto electrones no enlazantes es equivalente, es decir que* $L_Z(G)$ *es un* Z-álgebra *asociativa y recíprocamente.*

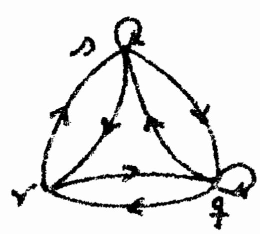
EJEMPLO 3.1.

(i) Sea G el 1-grafo



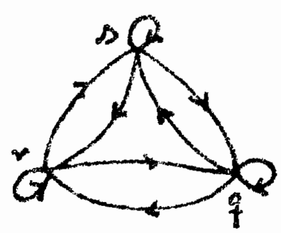
Sabemos, por 2.1, que $L_Z(G)$ no es asociativa. Esto quiere decir que no es posible hacer nuevos enlaces partiendo de s. Esto es, no existe enlace adicional entre los átomos r y s ó s y q, y a fortiori entre r y q.

(ii) Sea G el 1-grafo



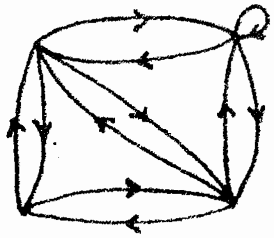
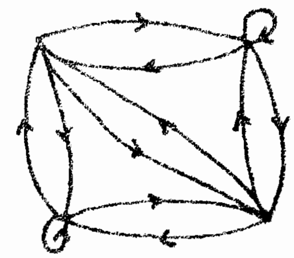
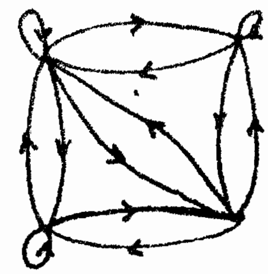
Entonces $L_Z(G)$ no es asociativa, o sea, que podemos hacer solamente un nuevo enlace entre s y q. Por tanto, un enlace adicional entre r y s ó entre r y q está excluido.

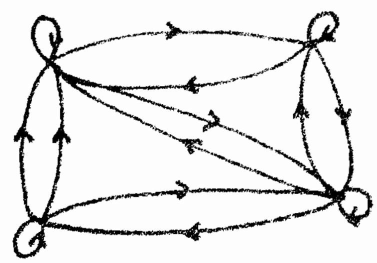
(iii) Sea G el 1-grafo



En este caso, $L_Z(G)$ es un Z-álgebra asociativa. En consecuencia, podemos hacer nuevos enlaces entre dos cualesquiera de los tres vértices de G, i.e, ó entre r y s, ó r y q ó s y q.

(iv) Si G es un 1-grafo de orden 4 podemos tener los siguientes casos:


,

,


y


En consecuencia, podemos hacer, respectivamente 0, 1,1 y 2 nuevos enlaces entre dos vértices cualesquiera de G.

Recalcamos que, solamente, cuando podemos establecer nuevos enlaces $L_Z(G)$ es un Z-álgebra asociativa.

NOTA. Evidentemente, esta interpretación es válida también en las condiciones de las proposiciones 2.6 y 2.9.

NOTACIONES

Z	:	anillo de los enteros.
K	:	anillo conmutativo con elemento identidad.
$M_n(K)$	:	conjunto de matrices cuadradas n x n con coeficientes en K.
$L_K(G)$	:	algebra asociado a un p-grafo G.
$G(B)$	:	grafo asociado a una matriz cuadrada n x n con coeficientes enteros no negativos B.
A	:	conjunto finito de átomos.
FEMI(A)	:	familia de conjuntos moleculares isómeros.
EM(A)	:	conjunto molecular en FEMI(A).

BIBLIOGRAFIA

|1| Costa, R y Micali, A. Algèbres Associées a un graphe, Anais da Academia Brasileira de Ciências, Vol. 48 Nº 2 (1976).

|2| Dugundji y Ugi. An algebraic Model of Constitutional Chemistry as a basis for chemical Computer Programs. Topics in current Chemistry (1973), 39.

|3| Dugundji, J, Gillespie, P., Marquarding, D., Ugi, I. and Ramirez, F. Metric Spaces and Graphs Representing the Logical Structura of Chemistry in Chemical Applications of Graph Theory ed. by A.T. Balaban (1976). Academic Press. P. 107.