UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

**Propuesta TFG.** Curso 2024/2025

**GRADO:** Grado en Química

**CÓDIGO DEL TFG:** 291-092-2024/2025

## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Teoría de grafos

**Descripción general (**resumen y metodología):

En este TFG se pretende estudiar la teoría matemática de grafos y entender cómo esto se aplica a la representación de diferentes objetos químicos como moléculas, reacciones, cristales, polímeros...

Se estudiarán algunos conceptos matemáticos como arcos simples, curvas poligonales, grafos y árboles. Posteriormente se estudiarán grafos planos y el teorema de Kuratowski, así como las representaciones matriciales de grafos.

Todo lo anterior se usará para definir el concepto de grafo químico y la topología molecular. Se estudiarán grafos de Hückel y de Kekulé. Se desarrollará la teoría de los grafos polihexagonales y benzenoidales, y finalmente se estudiarán los grafos con peso.

**Tipología:** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

**Objetivos planteados:**

El objetivo principal de este trabajo es hacer una introducción a la teoría de grafos químicos, desarrollando algunos conocimientos matemáticos básicos para su comprensión y entender su relación con diferentes problemas en Química como la representación de moléculas o polímeros, la nomenclatura de compuestos químicos, la enumeración de isómeros...

A lo largo de la realización de la memoria el alumno tendrá reuniones periódicas con el tutor para indicarle qué conceptos y resultados debe ir estudiando, qué libros de la bibliografía debe usar para ello y explicarle algunos detalles preliminares necesarios para su comprensión. Una vez hecho el estudio de cada una de las partes el alumno aprovechará estas reuniones periódicas para preguntar las dudas que haya ido acumulando en su estudio.

Para afianzar la comprensión de cada parte del trabajo, el alumno irá redactando todo lo estudiado y pasará las notas al tutor para que éste las corrija y haga las aclaraciones que estime oportunas a la luz de lo expuesto en dicha redacción.

Cuando el estudio haya finalizado el alumno entregará una memoria final al tutor para su corrección y le hará una exposición de lo aprendido a través de todo el trabajo.

**Bibliografía básica:**

Nenad Trinajstic, Chemical Graph Theory, CRC Press, 1992.

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

**Plazas:** 1

## 2. DATOS DEL TUTOR/A:

**Nombre y apellidos:** JOSÉ ANTONIO GÁLVEZ LÓPEZ

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** GEOMETRÍA Y TOPOLOGÍA

**Correo electrónico:** jagalvez@ugr.es

**3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Ámbito de conocimiento/Departamento:**

**Correo electrónico:**

**4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**

**Nombre de la empresa o institución:**

**Dirección postal:**

**Puesto del tutor en la empresa o institución:**

**Centro de convenio Externo:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**