



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS
MATEMÁTICAS

FACULTAD DE CIENCIAS

"Teoría espectral de gráficas y su relación
con problemas en química y física"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

P R E S E N T A

Leonel Enrique Mendoza Márquez

DIRECTOR DE TESIS: Dr. José Antonio Stephan de la Peña Mena

MÉXICO, D. F.

Abril 2005

m 343305



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Contenido

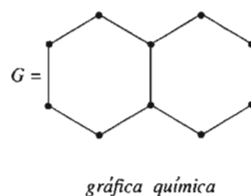
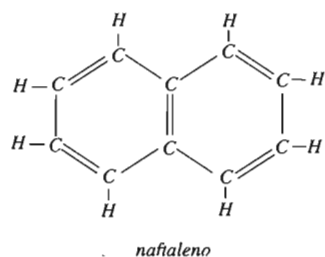
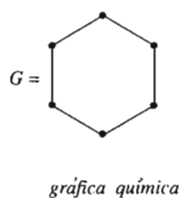
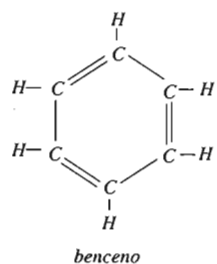
Introducción	III
1. Preliminares	1
1.1. Gráficas y matriz de adyacencia	1
1.2. Invariantes de una gráfica	5
1.3. Inmersión de gráficas en el espacio \mathbb{R}^3	5
1.4. Cubierta de Galois de una Gráfica	10
1.4.1. Propiedades de una cubierta de Galois	11
1.4.2. Ejemplos	12
1.4.3. Cubierta universal	12
1.5. Grupo fundamental de una gráfica	14
2. Gráficas químicas	15
2.1. Gráficas químicas	15
2.2. Teoría de Hückel (HMO)	16
2.3. Invariantes de gráficas químicas	18
2.4. Invariantes y propiedades físicas y químicas	20
2.4.1. π -Energía vs Calores de formación	20
2.4.2. Índice de Randić vs Punto de ebullición	21
2.5. Gráficas kekuléanas	21
3. Sistemas hexagonales	25
3.1. Sistemas hexagonales	25
3.2. Complejo CW de un sistema hexagonal	29
4. Gráficas bencenoides	33
4.1. Gráficas bencenoides	33
4.2. Número de estructuras de Kekulé de gráficas bencenoides	37
4.3. Índice de Randić de gráficas bencenoides	38
4.4. Momento espectral de una gráfica bencenoide	41

4.4.1.	Momento espectral de gráfica bencenoide generado por subgráficas árboles.	42
4.4.2.	Momento espectral de gráfica bencenoide generado por subgráficas no árboles	46
4.4.3.	Momentos $M_4(G)$ y $M_6(G)$ para gráficas bencenoides	49
4.5.	Cota del momento espectral $M_6(G)$ para gráficas bencenoides catacondensadas	50
4.6.	π -energía y momento espectral	52
4.7.	π -energía y estructura de Kekulé	55
4.8.	Ejemplo	57
5.	Sistemas hexagonales orientables	59
5.1.	Grupo fundamental de un sistema hexagonal	59
5.2.	Rango del grupo fundamental de un sistema hexagonal	65
5.3.	Cubierta universal de un sistema hexagonal	72
5.4.	Dominio fundamental de un sistema hexagonal	75
5.5.	Estructura de sistemas hexagonales	78
5.6.	Invariantes asociados a un sistema hexagonal en \mathbb{R}^3	83
5.6.1.	Número de vértices y número de aristas	83
5.6.2.	Momento espectral	86
5.6.3.	Energía de un sistema hexagonal con frontera	93
5.6.4.	Ejemplo	94
	Bibliografía	97

Introducción

Consideraremos $G = (G_0, G_1)$ una gráfica finita, con n vértices y m aristas. Definimos la *matriz de adyacencia* $A_G = (a_{ij})$ de G como la matriz de tamaño $n \times n$ con coeficientes $a_{ij} = 1$ si los vértices i y j son adyacentes y $a_{ij} = 0$ si no lo son. La matriz A_G es una matriz simétrica y no negativa. Definimos el *espectro* de G como la sucesión no creciente de los valores propios de la matriz A_G , lo denotaremos por $\text{Spec}(G) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ donde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

Sea $G = (G_0, G_1)$ una gráfica simple, esto es, G no contiene lazos o aristas múltiples. Denotaremos el grado de un vértice $x \in G_0$ por $d(x)$. Diremos que G es una *gráfica química* si G es conexa y $d(x) \leq 4$ para toda $x \in G_0$. Las gráficas químicas son modelos de una molécula o compuesto químico, en particular, consideraremos moléculas formadas por átomos de carbonos (C) e hidrógenos (H), llamadas hidrocarburos conjugados. Tales gráficas tienen como vértices los átomos de carbonos y como aristas los enlaces químicos entre los átomos.



Un sistema hexagonal $G = (G_0, G_1, \mathcal{H}(G))$ está dado por un conjunto finito de vértices G_0 , un conjunto de aristas $G_1 \subset G_0^2$ y un conjunto $\mathcal{H}(G) \subset G_1^6$ de hexágonos, cumpliendo:

(H1) cada arista $a = \{x, y\} \in G_1$, cumple que $x \neq y$ y pertenece a un hexágono (esto es, existe $a' \in G_1^5$ con $(a, a') \in \mathcal{H}(G)$).

(H2) cada vértice $x \in G_0$, pertenece a lo más a tres aristas en G (esto es, el grado $d(x) \leq 3$).

(H3) cada hexágono $\{a_1, a_2, \dots, a_6\} \in \mathcal{H}(G)$ está formado por pares diferentes de aristas con $a_i \cap a_{i+1}$ un vértice común de a_i y a_{i+1} para $i = 1, 2, \dots, 6$ y $a_7 = a_1$. Más aún, dos hexágonos tiene a lo más una arista en común.

Los sistemas hexagonales han sido extensivamente estudiados por ser modelos naturales de los hidrocarburos cíclicos conjugados, en particular, se han estudiado las relaciones entre sus propiedades físico química de la molécula y los invariantes de la gráfica química asociada.

Algunos invariantes se expresan como funciones simples de la estructura combinatoria de la gráfica. Por ejemplo, el 1-índice de conectividad o índice de Randić de una gráfica química G se define como: ${}^1\mathcal{X}(G) = \sum_{i-j \in G_1} \frac{1}{\sqrt{d(i)d(j)}}$.

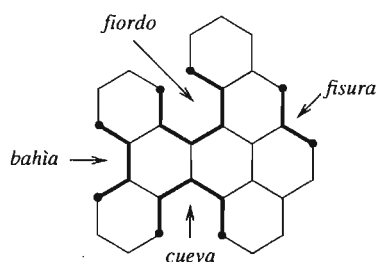
Si G es la gráfica química asociada a un compuesto alcano (G es un árbol), entonces ${}^1\mathcal{X}(G)$ tiene correlación con el punto de ebullición y la estabilidad del compuesto, ver [29].

La teoría espectral de gráficas es a menudo utilizada para este propósito ya que invariantes algebraicos asociados a la gráfica contienen información relevante acerca de la estructura molecular, ver [6, 12]. Adicionalmente, las aplicaciones de técnicas topológicas han aumentado en este campo en los últimos años, ver [9, 10].

La teoría de Hückel, ver [12], relaciona los valores propios de la matriz de adyacencia A_G de una gráfica química G , con cantidades relacionadas con propiedades físico químicas de la moléculas que representan. La π -energía de una gráfica G está definida como $E_\pi(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$ con $\lambda_i \in \text{Spec}(G)$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Esta energía tiene una buena correlación con valores experimentales de calores de formación de las moléculas que representan, ver [12, 13].

El k -ésimo momento espectral de G está definido como $M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k$ con $\lambda_i \in \text{Spec}(G)$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Desde los primeros trabajos de Hall [17, 18], los momentos espectrales tiene muchas aplicaciones en química cuántica, el cálculo de la π -energía, entre otros, ver por ejemplo [13, 22, 23, 25].

Los hidrocarburos bencenoides, los cuales se modelan por sistemas hexagonales planos, han sido muy estudiados, entre estos estudios podemos mencionar: la determinación de invariantes como los momentos espectrales, el índice de Randić, la π -energía, entre otros. Además podemos mencionar el estudio de propiedades topológicas (estructura) como la estructura de Kekulé (1-factor), entradas de un sistema bencenoides fisuras, bahías, cuevas y fiordos:

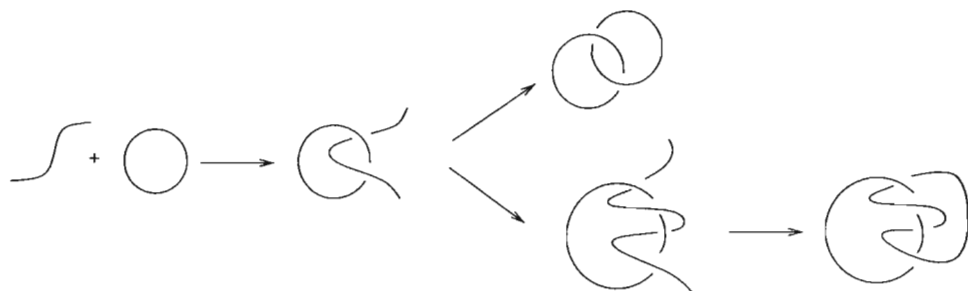


y su relación de éstas entradas con los momentos espectrales. Referencias generales sobre los sistemas hexagonales planos, ver [6, 7, 11, 12, 13, 14, 23, 33, 35, 36, 39].

El campo de investigación que se ocupa de estudiar, fabricar, diseñar y controlar materiales a nivel mesoscópico es la *nanotecnología*. Recientemente, el desarrollo de la nanotecnología ha hecho relevante la consideración de sistemas hexagonales cilíndricos, cónicos y otros sistemas en el espacio, ver [21, 40]. Las nanoestructuras curvas que más atención han recibido son los nanotubos de carbono, debido a su gran potencial en diversas aplicaciones como emisores de electrones para pantallas de televisión ultradelgadas, puntas para microscopios de fuerza atómica y de efecto tunel, la fabricación de nanoalambres en dispositivos electrónicos, entre otros.

Recientes trabajos en química han reportado hidrocarburos con propiedades topológicas interesantes que incluyen nudos, enlaces (catenanos), bandas de Möbius y otras estructuras. La primera síntesis exitosa de un catenano

fue dada por Wasserman [43] en 1961 usando la técnica de *macro ciclización*, la cual consiste en la formación de moléculas cíclicas con al menos 34 átomos. Una vez creada la molécula cíclica, el objetivo es *concatenar o concadenar* una segunda molécula lineal a través de la molécula cíclica para luego pegar su puntas tal como se muestra en la siguiente Figura:



Desde la síntesis exitosa de Wasserman de un catenano, los químicos han creado varias técnicas para sintetizar moléculas anudadas, ver [8, 42].

En este trabajo consideraremos sistemas hexagonales G en \mathbb{R}^3 . El objetivo principal es obtener fórmulas y cotas de invariantes gráficos como número de vértices $n(G)$, números de aristas $m(G)$, números de hexágonos $h(G)$, los momentos espectrales y la π -energía que generalicen los resultados ya conocidos de los sistemas hexagonales planos. Un invariante que no necesita ser considerado en el caso plano, pero que en general es de mayor relevancia es el grupo fundamental $\pi_1(G)$ de G .

Dado un sistema hexagonal G en \mathbb{R}^3 estabilizado por la acción de un grupo Γ , (el cual actúa libremente sobre los vértices de G), el cociente natural $\pi : G \rightarrow G/\Gamma$ se dice ser la cubierta de Galois definida por la acción de Γ . Para un sistema hexagonal finito construiremos una *cubierta universal* $\pi : \tilde{G} \rightarrow G$, (esto es para cualquier cubierta de Galois $\pi' : G' \rightarrow G$, existe un único morfismo $\bar{\pi} : \tilde{G} \rightarrow G'$ con $\pi = \pi'\bar{\pi}$). La aplicación π está definida por la acción del grupo fundamental $\pi_1(G)$ de G . Este grupo es también el grupo fundamental del CW-complejo $cw(G)$ del sistema hexagonal G .

Un sistema hexagonal G tiene *frontera* si tiene al menos un vértice de grado dos. En el caso que G no tenga frontera y $cw(G)$ sea orientable, es bien conocido que $cw(G)$ es un toro topológico y por lo tanto $\pi_1(G) = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$. Para el caso con frontera probaremos el siguiente resultado:

Teorema 1: *Sea G un sistema hexagonal finito con frontera, entonces $\pi_1(G)$ es un grupo libre (no abeliano).*

El rango del grupo fundamental $\pi_1(G)$ de un sistema hexagonal G , denotado por $rk(\pi_1(G))$, es un invariante importante del sistema hexagonal. El rango puede ser numéricamente obtenido del número de vértices $n(G)$, número de aristas $m(G)$ y el número de hexágonos $h(G)$ de G . Así probaremos el siguiente resultado:

Teorema 2: *Sea G un sistema hexagonal finito conexo con frontera, entonces*

$$rk(\pi_1(G)) = m(G) - h(G) - n(G) + 1.$$

Si el grupo fundamental $\pi_1(G) = 0$, entonces G es un sistema hexagonal plano.

Un problema considerado en detalle es la dependencia de $M_k(G)$ y $E_\pi(G)$ con la estructura molecular de G . Esta dependencia ha sido resuelta para $k \leq 12$ para sistemas hexagonales planos. No se conoce mucho para sistemas hexagonales en \mathbb{R}^3 .

Una propiedad estructural de un sistema hexagonal plano G es que cualquier ciclo C es de longitud par y si la longitud es divisible por cuatro, entonces en el interior de C existe un número impar de vértices. Diremos que un sistema hexagonal G en \mathbb{R}^3 es *regular* si todo ciclo C tiene longitud al menos seis y en este caso C define un hexágono en G .

Para $t \geq 1$, una t -entrada sobre la frontera de un sistema hexagonal es una trayectoria con sucesión de grados

$$(2, \underbrace{3, 3, \dots, 3}_t, 3, 2),$$

en particular una 1-entrada es una *fisura*, 2-entrada es una *bahía*, 3-entrada es una *cueva* y 4-entrada es un *fiordo*. Sea $B_t(G)$ el total de las t -entradas de G para $t \geq 1$. Definimos el *total de entradas* de G como $r(G) = \sum_{t \geq 1} B_t(G)$.

Teorema 3: *Sea G un sistema hexagonal conexo con frontera, entonces*

$$n(G) + i(G) = 4h(G) + 2(1 - rk(\pi_1(G))).$$

$$m(G) + i(G) = 5h(G) + (1 - rk(\pi_1(G))).$$

Donde $i(G)$ es el total de vértices internos (vértices que están en tres hexágonos a la vez).

Este resultado generaliza la ecuaciones conocidas para el caso de sistemas hexagonales planos ($rk(\pi_1(G)) = 0$).

Dado un sistema hexagonal G y $i, j, k \in \{2, 3\}$ denotaremos por $m_{ijk}(G)$ el número de trayectorias en G con sucesión de grado (i, j, k) . Demostraremos el siguiente resultado:

Teorema 4: *Sea G es un sistema hexagonal regular en \mathbb{R}^3 con frontera. Entonces*

1. $M_4(G) = 18m(G) - 12n(G)$.
2. $M_6(G) = 146m(G) - 126n(G) + 12(1 - rk(\pi_1(G))) - 6r(G)$.
3. $M_8(G) = 1186m(G) - 1140n(G) + 192(1 - rk(\pi_1(G))) - 96r(G) + 8(f(G) + m_{222}(G)) + 16N_{\{8\}}$, donde $f(G)$ es el total de fisuras y $N_{\{8\}}$ es el total de ciclos de longitud ocho.

Las fórmulas obtenidas para $M_4(G)$, $M_6(G)$ y $M_8(G)$ con G un sistema hexagonal regular en \mathbb{R}^3 generalizan las fórmulas ya conocidas de éstos momentos espectrales para el caso de sistemas hexagonales planos.

En [33], obtuvimos cotas inferiores para la π -energía $E_\pi(G)$ con G un sistema hexagonal plano. Estas cotas se cumplen directamente para sistemas hexagonales en \mathbb{R}^3 y tenemos el siguiente resultado.

Proposición 5: *Sea G un sistema hexagonal con $rk(\pi_1(G)) > 0$, entonces se cumple:*

1. Si q, t, s son enteros positivos pares y $4q = t + s + 2$, entonces

$$M_q^2(M_t M_s)^{-1/2} \leq E_\pi(G).$$

En particular, para $(2, 2, 4)$ y $(4, 6, 8)$, obtenemos:

$$2\sqrt{2} m \sqrt{\frac{m}{M_4}} \leq E_\pi(G) \quad \text{y} \quad \frac{M_4^2}{\sqrt{M_6 M_8}} \leq E_\pi(G).$$

2. $(16/27)^{1/2} \sqrt{2n(G)m(G)} \leq E_\pi(G) \leq \sqrt{2n(G)m(G)}$. Dada por McClelland [28].

Se sabe de [22] que para una gráfica química G :

$$E_\pi(G) \approx E_\pi(L) = \sum_{i=0}^L \alpha_{2i} M_{2i}(G) - \alpha_0 \eta(G),$$

donde $\eta(G)$ es la multiplicidad del valor propio cero en el espectro de G y

$$\alpha_0 = \frac{1}{\pi} \frac{6}{2L+1},$$

$$\alpha_{2i} = (-1)^{i+1} \frac{1}{\pi} \frac{2^{2i+1}}{3^{2i-1}} \frac{(L+i)!}{(2L+1)(2i-1)(2i)!(L-i)!}.$$

Para un sistema hexagonal regular G en \mathbb{R}^3 , obtendremos expresiones explícitas de $E_\pi(L)$ para $L = 2, 3, 4$ y tenemos que en la mayoría de los ejemplos, $E_\pi(4)$ es una buena aproximación para la π -energía $E_\pi(G)$ como veremos en el capítulo 5.

Los resultados enunciados anteriormente son las contribuciones nuevas a la teoría de los sistemas hexagonales en el espacio tres dimensional.

Este trabajo se desarrolla en cinco capítulos, donde los capítulos principales son los capítulos 3 y 5 y cuyo contenido describiremos a continuación:

Capítulo 1: presentamos la mayor parte de los conceptos y herramientas básicas que se usarán a lo largo de todo el trabajo como la matriz de adyacencia A_G de una gráfica G , inmersión de gráficas en \mathbb{R}^3 y la cubierta de Galois de una gráfica.

Capítulo 2: estudiamos las gráficas químicas, en particular definimos algunos invariantes y su relación con propiedades físicas y químicas de la molécula que representan.

Capítulo 3: introducimos los sistemas hexagonales en \mathbb{R}^3 y definimos el complejo CW de un sistema hexagonal. Demostraremos que el único sistema hexagonal en \mathbb{R}^3 orientable y sin frontera es el toro.

Capítulo 4: hacemos un estudio detallado de los sistemas hexagonales planos (gráficas bencenoides).

Capítulo 5: estudiamos los sistemas hexagonales en \mathbb{R}^3 , como su grupo fundamental, rango del grupo fundamental, en estas secciones demostraremos los Teoremas 1. y 2. Veremos también la cubierta universal y los invariantes gráficos asociados a un sistema hexagonal en \mathbb{R}^3 y demostraremos los Teoremas 3. y 4.

Este trabajo lo realicé siendo Profesor Becario de la Universidad de Los Andes (ULA) y como estudiante del Postgrado de Matemáticas asociado al Instituto de Matemáticas de la Universidad Autónoma de México (IMATE-UNAM). Expreso mi agradecimiento a estas dos instituciones.

Quiero dar las gracias al Profesor José Antonio de la Peña Mena, por haberme aceptado como su estudiante y por la ayuda que me dio durante mi estancia en México.

Expreso mi agradecimiento a los Profesores: Hortensia Galeana, Michael Barot, Suemi Rodríguez, Juan Rada, Isidoro Gitler y Jorge Urrutia por haber aceptado ser Sinodales de esta tesis, sus sugerencias y correcciones fueron de mucha ayuda.

Doy las gracias al personal del IMATE y del Postgrado de Matemáticas de la UNAM, especialmente a Rosi y Teresa.

Por último, a mis heramos mexicanos Berta, Coty y Clemente Gonzalez.

Capítulo 1

Preliminares

En este capítulo daremos definiciones, notaciones y resultados que serán útiles a lo largo del trabajo. Denotaremos por \mathbb{R} al campo de los números reales.

1.1. Gráficas y matriz de adyacencia

Una *gráfica* G es un par $G = (G_0, G_1)$, donde G_0 es un conjunto cuyos elementos son llamados *vértices* y $G_1 \subset G_0^2$ el conjunto de pares no ordenado $a = \{x, y\}$ con $x, y \in G_0$, que llamaremos *aristas*. Si $a = \{x, y\} \in G_1$ decimos que los vértices x e y son *adyacentes*, y que la arista a *incide* en los vértices x e y . El *grado* de un vértice x es el número de aristas que inciden en x y lo denotaremos por $d(x)$.

Teorema 1.1.1 (*Euler [20]*) Sea $G = (G_0, G_1)$ una gráfica con n vértices y m aristas, entonces $\sum_{i=1}^n d(x_i) = 2m$. \square

Para detalles relacionados con gráficas consultar Harary [20].

Consideraremos gráficas finitas, es decir, G_0 es un conjunto finito; sin aristas múltiples (entre dos vértices x, y existe a lo más una arista) y sin lazos (si $\{x, y\} \in G_1$, se tiene que $x \neq y$).

Sea G una gráfica y supongamos que el conjunto de vértices tiene n elementos, definimos la *matriz de adyacencia* A_G de la gráfica G , como la matriz de

tamaño $n \times n$ y coeficientes:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ y } j \text{ son adyacentes.} \\ 0 & \text{si no.} \end{cases} \quad (1.1)$$

para $1 \leq i, j \leq n$. La matriz A_G es una matriz simétrica y no negativa.

Definimos el *espectro* de G como la sucesión no creciente de los valores propios de la matriz A_G , denotaremos el espectro por $\text{Spec}(G) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ donde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

Una *orientación* (s, e) en las aristas de una gráfica $G = (G_0, G_1)$, es una pareja de funciones $s, e : G_1 \rightarrow G_0$ tal que para cada arista $a = \{x, y\}$ tenemos que $\{x, y\} = \{s(a), e(a)\}$. Para $a \in G_1$ con $s(a) = x$ y $e(a) = y$ definimos la arista a^{-1} con orientación $s(a^{-1}) = y$ y $e(a^{-1}) = x$.

Un *camino dirigido de longitud* $l \geq 1$ del vértice x al vértice y en una gráfica con orientación (s, e) , es una sucesión $\gamma = (y|a_l, \dots, a_2, a_1|x)$ donde $s(a_i) = e(a_{i-1})$ para toda $1 < i \leq l$ y x es el vértice inicial de a_1 e y es el vértice final de a_l . Podemos definir para cualquier vértice x en G un camino de longitud cero llamado *camino trivial* (de x a sí mismo) y que denotaremos por $\tau_x = (x|x)$. Un camino de longitud ≥ 1 de x a x es llamado *camino cerrado*.

Sea $\gamma = (y|a_n, a_{n-1}, \dots, a_2, a_1|x)$ un camino de x a y en una gráfica G , definimos el *camino inverso* de γ que denotaremos por

$$\gamma^{-1} = (x|a'_1, a'_2, \dots, a'_{n-1}, a'_n|y),$$

el camino de y a x con $a'_i = a_i^{-1}$ para $i = 1, 2, \dots, n-1, n$. Es decir, γ^{-1} se obtiene recorriendo γ en sentido contrario.

Dados dos caminos en G ,

$$\gamma_1 = (m|b_p, b_{p-1}, \dots, b_1|h) \quad \text{y} \quad \gamma_2 = (j|a_n, a_{n-1}, \dots, a_1|i),$$

definiremos el *producto* de γ_1 y γ_2 que denotaremos por $\gamma_1 \gamma_2$ como:

$$\gamma_1 \gamma_2 = \begin{cases} 0 & \text{si } h \neq j. \\ (m|b_p, b_{p-1}, \dots, b_1, a_n, a_{n-1}, \dots, a_1|i) & \text{si } h = j. \end{cases} \quad (1.2)$$

Una gráfica G se dice *conexa* si para cualquier par de vértices x e y existe un camino que los une.

Una gráfica $G = (G_0, G_1)$ se dice *bipartita* si existen conjuntos V_1 y V_2 disjuntos tales que $G_0 = V_1 \cup V_2$ y cada arista une un elemento de V_1 con un elemento de V_2 . Es claro que la matriz de adyacencia de una gráfica bipartita tiene la forma:

$$A_G = \left(\begin{array}{c|c} 0 & C \\ \hline C^t & 0 \end{array} \right) \quad (1.3)$$

donde C es llamada *matriz de incidencia* entre los conjuntos de bipartición V_1 y V_2 , y C^t es la matriz transpuesta de C .

Hay propiedades de la estructura de una gráfica G que pueden determinarse a partir de los valores propios de la matriz de adyacencia A_G de la gráfica G . Por ejemplo, si denotamos por $\text{tr}(A_G)$ la traza de la matriz A_G , tenemos que:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \text{tr}(A_G^2) = 2m$$

donde m es el número total de aristas en G . También se tiene:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = \text{tr}(A_G^3) = 6t$$

donde t es el número de triángulos en G , ver [30].

Para la demostración de los dos resultados siguientes, consultar [30].

Proposición 1.1.2 ([30]) Si A_G es la matriz de adyacencia de la gráfica G y $A_G^k = (a_{ij}^{(k)})$ es la k -ésima potencia de la matriz A_G , entonces $a_{ij}^{(k)}$ es el número de caminos de longitud k del vértice i al vértice j en G . \square

Proposición 1.1.3 ([30]) Las siguientes afirmaciones son equivalentes:

1. La gráfica G es bipartita.
2. G no tiene ciclos de longitud impar.
3. Si el polinomio característico es $P_G(t) = t^n + a_1 t^{n-1} + a_2 t^{n-2} + \dots + a_n$ se tiene $a_{2s+1} = 0$ para toda s .

4. El espectro de G es simétrico respecto al cero, esto es, si $\lambda \in \text{Spec}(G)$, entonces $-\lambda \in \text{Spec}(G)$ con la misma multiplicidad que λ . \square

Sea $G = (G_0, G_1)$ una gráfica finita y conexa. Sea A_G la matriz de adyacencia de la gráfica G . El *radio espectral* $\rho(G)$ de la gráfica G está definido como el radio espectral de su matriz de adyacencia:

$$\rho(G) = \sup \{ |\lambda| : \lambda \text{ es valor propio de } A_G \} = \rho(A_G).$$

Se dice que una matriz X de tamaño $n \times n$ es *reducible* si existe una matriz de permutación P , tal que

$$P X P^t = \begin{pmatrix} B & 0 \\ C & D \end{pmatrix},$$

donde B es una matriz cuadrada de tamaño $s \times s$ con $0 < s < n$. Decimos que una matriz X es *irreducible* si X no es reducible.

Observemos que A_G es irreducible si y sólo si la gráfica G es conexa. Entonces por el Teorema de Perron-Frobenius [30]; se tiene que $\rho(G) \in \text{Spec}(G)$ con multiplicidad uno y existe un vector v con todas sus entradas positivas ($v \gg 0$), tal que $A_G v = \rho(G)v$. Las demostraciones de los resultados siguientes están dadas en [30].

Lema 1.1.4 ([30]) Sea G una gráfica finita, conexa sin lazos y A_G su matriz de adyacencia con $A_G^k = (a_{ij}^{(k)})$, entonces existe $c > 0$ tal que

$$a_{ij}^{(k)} \leq c\rho(G)^k$$

para todo $i, j \in G_0$ y todo k . \square

Proposición 1.1.5 ([30]) Sea G una gráfica finita y conexa, entonces para cada $i, j \in G_0$ se tiene

$$\rho(G) = \limsup_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{a_{ij}^{(k)}}$$

donde $a_{ij}^{(k)}$ es el coeficiente (i, j) -ésimo de la matriz A_G^k . \square

Dos gráficas $G = (G_0, G_1)$ y $H = (H_0, H_1)$ se dicen *isomorfas* que denotaremos por $G \cong H$, si existe una aplicación biyectiva $f : G_0 \rightarrow H_0$ que preserva adyacencia, es decir, si $\{x, y\} \in G_1$, entonces $\{f(x), f(y)\} \in H_1$.

1.2. Invariantes de una gráfica

Un *invariante* de una gráfica G es un número asociado con G el cual tiene el mismo valor para cualquier gráfica isomorfa a G . Así el número de vértices, aristas y radio espectral son invariantes de una gráfica.

Si $0 \in \text{Spec}(G)$, sea $\eta(G)$ su multiplicidad algebraica, es claro que $\eta(G)$ es un invariante gráfico de G .

Para una gráfica bipartita G con n vértices, se sabe de [6] que:

$$\eta(G) = n - 2 \text{rank}(C) \quad (1.4)$$

donde C es la matriz de incidencia dada en la ecuación (1.3) y $\text{rank}(C)$ su rango.

1.3. Inmersión de gráficas en el espacio \mathbb{R}^3

Una *inmersión* $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ de una gráfica $G = (G_0, G_1)$ en \mathbb{R}^3 está dada por dos funciones inyectivas $\xi_0 : G_0 \rightarrow \mathbb{R}^3$ y $\xi_1 : G_1 \rightarrow \{f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid f \text{ curva diferenciable}\}$ tales que para cada arista $a = \{x, y\}$ se tiene que $\xi_1(a)(0) = \xi_0(x)$ y $\xi_1(a)(1) = \xi_0(y)$ y dos curvas diferenciables $\xi(a_1)$ y $\xi(a_2)$ se intersectan sólo en la imagen $\xi_0(x)$ de un vértice x en común de las aristas a_1 y a_2 .

En la Figura 1.1 vemos un ejemplo de una inmersión $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ de una gráfica G con $G_0 = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ conjunto de vértices y $G_1 = \{a_1 = \{x_1, x_2\}, a_2 = \{x_3, x_4\}\}$ conjunto de aristas, donde $\xi(x_1) = (0, 0, 0)$, $\xi(x_2) = (1, 1, 1)$, $\xi(x_3) = (0, 1, 0)$ y $\xi(x_4) = (1 + \epsilon, 0, 1)$ y los arcos están dados por:

$$\xi(a_1) = \{(t, t, t) : t \in [0, 1]\}$$

uniendo $(0, 0, 0)$ con $(1, 1, 1)$ y

$$\xi(a_2) = \{((1 + \epsilon)t, 1 - t, t) : t \in [0, 1]\}$$

uniendo $(0, 1, 0)$ con $(1 + \epsilon, 0, 1)$.

Sean $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ y $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ dos homeomorfismos, decimos que f y g son *isotópicos* si existe una función continua $H : \mathbb{R}^3 \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que:

1. $H(x, 0) = f(x)$ para toda $x \in \mathbb{R}^3$.

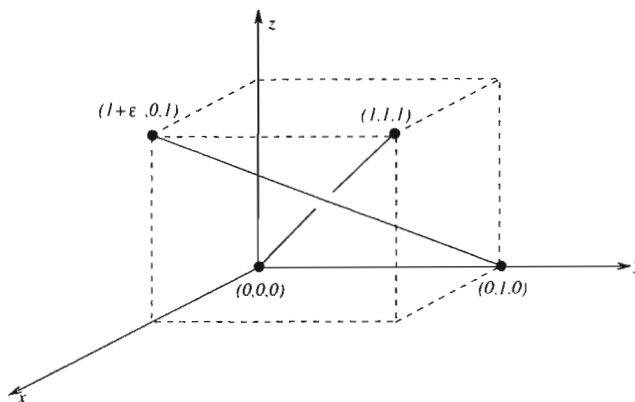


Figura 1.1: Gráfica en \mathbb{R}^3 .

2. $H(x, 1) = g(x)$ para toda $x \in \mathbb{R}^3$.
3. $H(x, t)$ es un homeomorfismo para cada t fija del intervalo $[0, 1]$.

Intuitivamente dos homeomorfismos son isotópicos si uno puede deformarse continuamente en el otro. Todo homeomorfismo $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ es isotópico a la aplicación identidad o a la aplicación reflexión pero no a ambos, ver [9].

Sea $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ un homeomorfismo. Si f es isotópico a la aplicación identidad, decimos que f *preserva orientación*. Si f es isotópico a la aplicación reflexión, decimos que f *invierte orientación*.

Se dice que dos inmersiones $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ y $\eta : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ de una gráfica G en \mathbb{R}^3 son *equivalentes* si existe un homeomorfismo $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que preserva orientación tal que $f\xi = \eta$.

Proposición 1.3.1 Sean $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ y $\eta : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ dos inmersiones en \mathbb{R}^3 de una gráfica G . ξ y η son equivalentes si y sólo si existe una función continua $H : \mathbb{R}^3 \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que:

1. $H(x, t)$ es un homeomorfismo para toda t fija en $[0, 1]$.
2. $H(x, 0) = x$, para toda $x \in \mathbb{R}^3$.
3. $H(\xi(x), 1) = \eta(x)$, para toda $x \in G$.

En este caso decimos que ξ y η son ambientalmente isotópicas.

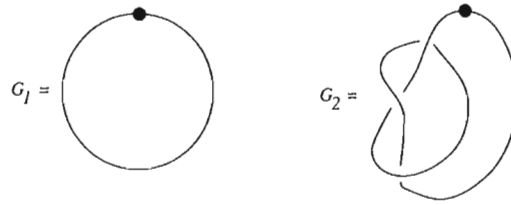


Figura 1.2:

Demostración:

Supongamos que ξ y η son equivalentes, luego existe un homeomorfismo $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ que preserva orientación tal que $f\xi = \eta$. Como f y la aplicación identidad son isotópicos, existe una función continua $H : \mathbb{R}^3 \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que

1. $H(x, t)$ es un homeomorfismo para toda $t \in [0, 1]$ fija.
2. $H(x, 0) = x$ para toda $x \in \mathbb{R}^3$.
3. $H(x, 1) = f(x)$ para toda $x \in \mathbb{R}^3$.

En particular tenemos que $H(\xi(x), 1) = f(\xi(x)) = \eta(x)$ para toda $x \in G$.

Recíprocamente, veamos que ξ y η son equivalentes. Definimos $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ por $f(x) = H(x, 1)$, la cual por hipótesis es un homeomorfismo que preserva orientación y $f(\xi(x)) = H(\xi(x), 1) = \eta(x)$, para toda $x \in G$. Por lo tanto, ξ y η son equivalentes. \square

Las gráficas G_1 y G_2 de la Figura 1.2, no son ambientalmente isotópicas, ya que no podemos deformar la gráfica con el nudo trébol G_2 a la gráfica que no tiene nudo G_1 , ver [9].

Sea G una gráfica finita y $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ una inmersión. Una proyección $\pi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ determina un *diagrama* $D = \pi\xi(G)$ de G si se cumple:

1. $|(\pi\xi)^{-1}(x)| \leq 2$, para toda $x \in \mathbb{R}^2$.
2. $|\{x \in \mathbb{R}^2 : |(\pi\xi)^{-1}(x)| = 2\}| < \infty$.

Lema 1.3.2 ([9, 45]) *Sea G una gráfica finita, sin lazos y aristas múltiples y $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ una inmersión de G en \mathbb{R}^3 . Para cualquier proyección $\pi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$, existe una inmersión $\xi' : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ equivalente a ξ tal que $D = \pi\xi'(G)$ es un diagrama de G .* \square

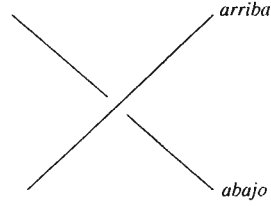


Figura 1.3: Trazo por *arriba* y por *abajo* de un diagrama.

Dado un diagrama $D = \pi\xi(G) \subset \mathbb{R}^2$ de una gráfica G , indicamos las ramas de la intersección la que corresponde por *arriba* por un trazo continuo y la que corresponde por *abajo* por un trazo no continuo, ver Figura 1.3.

Decimos que una gráfica G es *plana* si existe una inmersión $\xi' : G \hookrightarrow \mathbb{R}^2$, esto es, $\xi'(a)$ son curvas diferenciables para cada arista a de G y $\xi'(a_1)$ y $\xi'(a_2)$ puede sólo intersectarse en $\xi(x)$ si x es un vértice común de a_1 y a_2 .

Para los detalles del siguiente resultado consultar [44].

Proposición 1.3.3 *Dado un diagrama $D = \pi\xi(G) \subset \mathbb{R}^2$ de G y $D' \subset \mathbb{R}^2$. Existe un homeomorfismo que preserva orientación $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ y una proyección $\pi' : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ de forma que $\xi' = f\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ y $D' = \pi'\xi'(G)$ es un diagrama de G si y sólo si D' puede obtenerse de D por medio de un número finito de movidas de Reidemeister, ver Figura 1.4. \square*

La Figura 1.5 muestra un ejemplo donde el diagrama D' se obtiene por medio de un número finito de movidas de Reidemeister del diagrama D .

Consideremos una gráfica finita G , $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ una inmersión de G en \mathbb{R}^3 y un diagrama D de G de la forma dada en la Figura 1.6. En el primer caso, decimos que D tiene un *cruce positivo* y definimos un diagrama D^+ en la cual eliminamos el cruce. Similarmente, en la segunda situación, decimos que D tiene un *cruce negativo* y definimos un diagrama D^- en la cual eliminamos el cruce. En general escribiremos $\bar{D} = D^+$ ó D^- .

Decimos que una gráfica G es *cuasi plana* si existe un diagrama $D = \pi\xi(G)$ y una sucesión finita $D = D_0, D_1 = \bar{D}_0, D_2 = \bar{D}_1, \dots, D_s = \bar{D}_{s-1}$ tal que D_s es un diagrama sin cruces en las aristas y cada $D_{i+1} = D_i^+$ ó D_i^- .

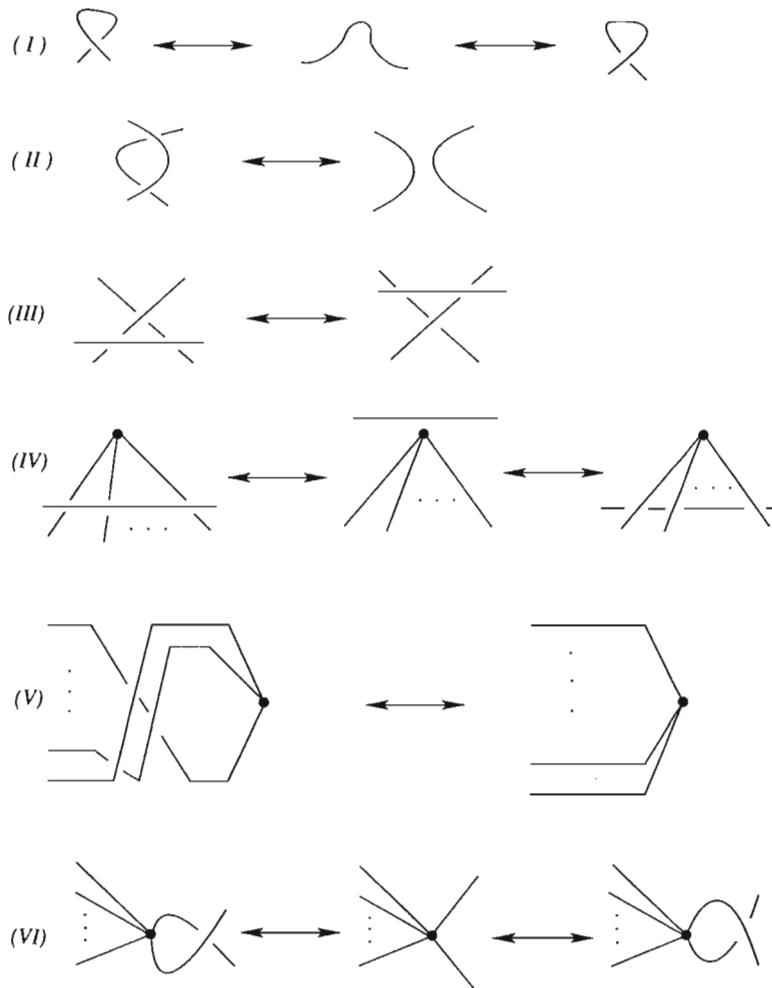


Figura 1.4: Movidas de Reidemeister.

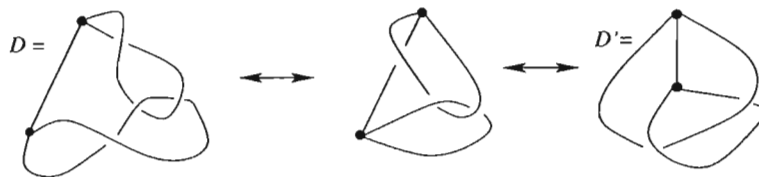


Figura 1.5: D' se obtiene de D por medio de movidas de Reidemeister.

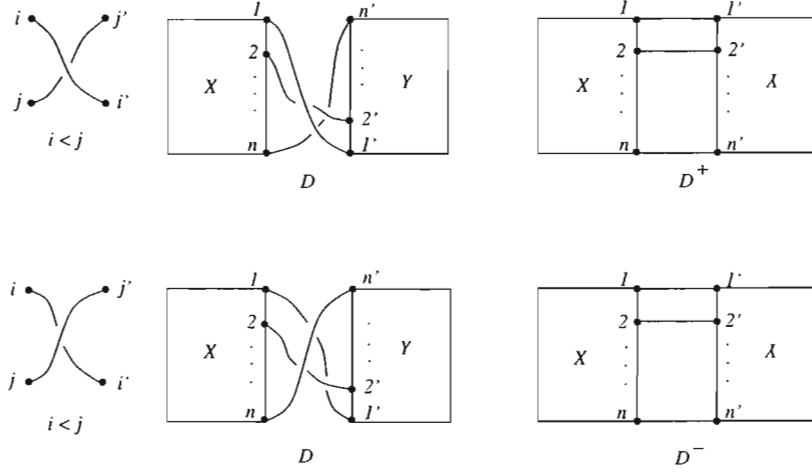


Figura 1.6: Cruce positivo y cruce negativo.

1.4. Cubierta de Galois de una Gráfica

Sean $\overline{G} = (\overline{G}_0, \overline{G}_1)$ y $G = (G_0, G_1)$ dos gráficas, un *morfismo* $\varphi : \overline{G} \rightarrow G$ de gráficas es un par de funciones $\varphi_0 : \overline{G}_0 \rightarrow G_0$ y $\varphi_1 : \overline{G}_1 \rightarrow G_1$ tales que: $\varphi(a = \{x, y\}) = \varphi_1(a) = \{\varphi_0(x), \varphi_0(y)\}$.

Sea $\pi : \overline{G} \rightarrow G$ un morfismo de gráficas, diremos que π es *sobre* si para cada arista $a \in G_1$ existe $b \in \overline{G}_1$ tal que $\pi(b) = a$.

Sea H un grupo de automorfismos de la gráfica \overline{G} actuando libremente en \overline{G} , es decir, si para algún $h \in H$, tal que $h(x) = x$ ó $h(a) = a$, con $x \in \overline{G}_0$ ó $a \in \overline{G}_1$; entonces $h = 1$.

Un morfismo sobre, $\pi : \overline{G} \rightarrow G$, es una *cubierta de Galois definida por el grupo* H , si H actúa libremente sobre \overline{G} y se cumplen las siguientes propiedades:

1. $\pi h = \pi$ para cada $h \in H$.
2. Para cada $x \in \overline{G}_0$ se tiene que $\pi^{-1}\pi(x) = H_x$ y respectivamente se tiene que $\pi^{-1}\pi(a) = H_a$ para cada $a \in \overline{G}_1$, donde denotaremos por H_x la órbita del vertice x y H_a la órbita de la arista a .

Lema 1.4.1 ([31]) Sea $\pi : \overline{G} \rightarrow G$ una cubierta de Galois definida por la acción del grupo H . Sea (s, e) una orientación en las aristas de G (sección 1.1). Entonces existe una orientación $(\overline{s}, \overline{e})$ en las aristas de \overline{G} que satisface:

1. $\pi\overline{s} = s\pi$ y $\pi\overline{e} = e\pi$.
2. $\overline{s}h = h\overline{s}$ y $\overline{e}h = h\overline{e}$, para todo $h \in H$. □

Sea $\pi : \overline{G} \rightarrow G$ una cubierta de Galois definida por la acción del grupo H . Fijemos una orientación (s, e) en las aristas de G y $(\overline{s}, \overline{e})$ una orientación en las aristas de \overline{G} que cumple las propiedades del Lema 1.4.1. Para $a \in \overline{G}_1$, definimos $\pi(a^{-1}) = \pi(a)^{-1}$. Para un camino $\gamma = (y|a_m, \dots, a_2, a_1|x)$ en \overline{G} del vértice $\overline{s}(\gamma) = x$ al vértice $\overline{e}(\gamma) = y$, definimos

$$\pi(\gamma) = (\pi(y)|\pi(a_m), \dots, \pi(a_2), \pi(a_1)|\pi(x))$$

un camino en G del vértice $\pi(x)$ al vértice $\pi(y)$.

1.4.1. Propiedades de una cubierta de Galois

Sea $\pi : \overline{G} \rightarrow G$ una cubierta de Galois definida por un grupo H . Tenemos las siguientes propiedades para π dadas en [31]:

1. Levantamiento único de caminos, esto es, para cada camino $\delta \in G$ y cada vértice $i \in \overline{G}_0$ con $\pi(i) = s(\delta)$, existe un único camino $\overline{\delta}$ en \overline{G} que satisface $\overline{s}(\overline{\delta}) = i$ y $\pi(\overline{\delta}) = \delta$.
2. Sean $\overline{A}_{\overline{G}} = (\overline{a}_{ij})$ y $A_G = (a_{ij})$ las matrices de adyacencias de las gráficas \overline{G} y G respectivamente. Para cada $i, j \in \overline{G}_0$ y $m \geq 1$ tenemos:

$$\sum_{t : \pi(t) = \pi(j)} \overline{a}_{it}^{(m)} = a_{\pi(i)\pi(j)}^{(m)},$$

$$\sum_{t : \pi(t) = \pi(i)} \overline{a}_{ij}^{(m)} = a_{\pi(i)\pi(j)}^{(m)},$$

recordemos que $a_{ij}^{(m)}$ es el número de caminos de longitud m entre los vértices i y j en la gráfica G .

3. Sean $\rho(\overline{G})$ y $\rho(G)$ los radios espectrales de las gráficas \overline{G} y G respectivamente, entonces

$$\rho(\overline{G}) \leq \rho(G) \leq \rho(\overline{G})^2.$$

4. Si \overline{G} es una gráfica finita, entonces $\text{Spec}(G) \subseteq \text{Spec}(\overline{G})$ y $\rho(G) = \rho(\overline{G})$.

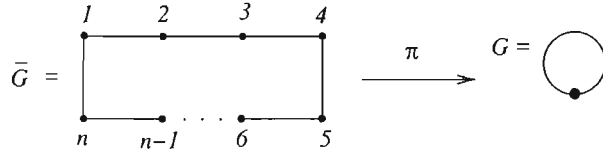


Figura 1.7: Cubierta de Galois.

1.4.2. Ejemplos

a) Sea \bar{G} una gráfica y H un grupo de automorfismo de \bar{G} actuando libremente sobre \bar{G} . Definamos la *gráfica cociente* \bar{G}/H como la gráfica cuyos vértices son las órbitas H_x con $x \in \bar{G}_0$ y cuyas aristas son las órbitas de la forma $H_a = \{H_x, H_y\}$ para cualquier arista $a = \{x, y\}$ de \bar{G} . Claramente el morfismo de gráficas

$$\pi : \bar{G} \rightarrow \bar{G}/H$$

dado por $a \mapsto H_a$, es una cubierta de Galois definida por la acción de H .

En la Figura 1.7 vemos un ejemplo de a), donde $\bar{G} = \tilde{A}_n$ es el ciclo de longitud n con $H = \mathbb{Z}_n$ actuando libremente sobre \bar{G} y la gráfica cociente $\bar{G}/H = G$ es la gráfica con un vértice y un lazo, entonces $\pi : \bar{G} \rightarrow G$ es una cubierta de Galois definida por H .

b) Sea H un grupo finitamente generado. Sea S un conjunto finito de generadores, tal que $1 \notin S$. La *gráfica de Cayley* $G = (H, S)$ tiene como conjunto de vértices $G_0 = H$ y para cada $h \in H$ y $s \in S$, una arista $s = \{h, hs\}$. Entonces H es un grupo de automorfismos de G que actúa libremente sobre G . La gráfica cociente G/H es un bouquet de $|S|$ lazos. Observemos que G es gráfica $2|S|$ -regular.

En la Figura 1.8 vemos un ejemplo de b), con H el grupo libre con dos generadores $\{a, b\}$. Sea \bar{G} la gráfica de Cayley $\bar{G}(H, \{a, b\})$, luego obtenemos una cubierta de Galois $\pi : \bar{G} \rightarrow G = \bar{G}/H$.

1.4.3. Cubierta universal

Sea $\pi : \tilde{G} \rightarrow G$ una cubierta de Galois definida por un grupo H , diremos que π es la *cubierta universal* de G si para cualquier cubierta de Galois $\pi' : G' \rightarrow G$, existe un morfismo $\bar{\pi} : \tilde{G} \rightarrow G'$ con $\pi = \pi' \bar{\pi}$.

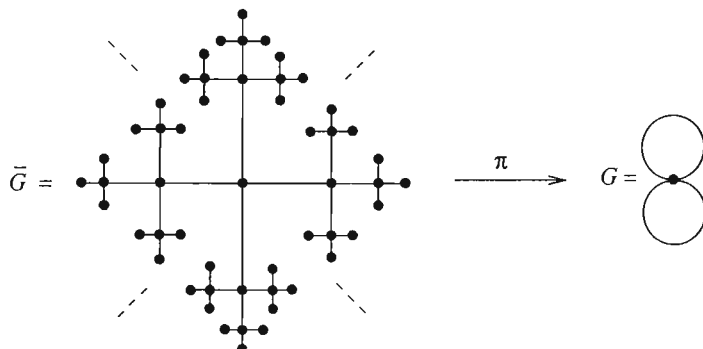


Figura 1.8: Cubierta de Galois.

Las siguientes proposiciones son versiones para gráficas de resultados bien conocidos en topología algebraica (ver [27]).

Proposición 1.4.2 *Consideremos el siguiente diagrama conmutativo de cubiertas de Galois*

$$\begin{array}{ccc}
 & \bar{G} & \\
 \bar{\pi} \swarrow & & \downarrow \pi \\
 G' & \xrightarrow{\pi'} & G
 \end{array}$$

donde π está definido por la acción de un grupo H , entonces existe $N \triangleleft H$ tal que N define a $\bar{\pi}$ y H/N define a π' . □

Recíprocamente,

Proposición 1.4.3 *Sea $\pi : \bar{G} \rightarrow G$ una cubierta de Galois definida por la acción de un grupo H . Entonces si N es un subgrupo normal de H , existe un diagrama conmutativo de cubiertas de Galois:*

$$\begin{array}{ccc}
 & \bar{G} & \\
 \bar{\pi} \swarrow & & \downarrow \pi \\
 G' & \xrightarrow{\pi'} & G
 \end{array}$$

donde N define a $\bar{\pi}$ y H/N define a π' . □

Observemos que una cubierta universal de G es única salvo isomorfismo.

1.5. Grupo fundamental de una gráfica

Sea G una gráfica conexa con (s, e) una orientación en las aristas de G . Fijemos x_0 un vértice de G . Tomemos el grupo $W(G, x_0)$ de los caminos cerrados dirigidos de x_0 a x_0 (con $\tau_{x_0} = (x_0|x_0)$ el camino cerrado de longitud cero de x_0 a x_0 como su elemento identidad y el producto de caminos como en (1.2).

Denotamos por \sim la relación de equivalencia en $W(G, x_0)$ inducida por las siguientes relaciones elementales:

1. Si $\gamma \in W(G, x_0)$, entonces $\gamma \gamma^{-1} \sim \tau_{x_0}$ y $\gamma^{-1} \gamma \sim \tau_{x_0}$.
2. Si $u \sim v$ por medio de 1., entonces $uwv' \sim wv'$ para todos los caminos que tiene sentido multiplicar.

La relación \sim es llamada *homotopía*. Esta relación y el producto de caminos son compatibles en el siguiente sentido: si $u_0 \sim u_1$ y $v_0 \sim v_1$, entonces $u_0v_0 \sim u_1v_1$.

Claramente, el conjunto de las clases de equivalencia de todos los caminos dirigidos de x_0 a x_0 forma un grupo. Este grupo se llama *grupo fundamental de G (con base x_0)* y se denota por $\pi_1(G, x_0)$.

Proposición 1.5.1 ([27]) *Sea G una gráfica conexa y fijemos dos vértices x_0 e y_0 en G , entonces $\pi_1(G, x_0)$ y $\pi_1(G, y_0)$ son grupos isomorfos.*

Demostración:

Sea $\gamma = \gamma_{x_0-y_0}$ un camino del vértice x_0 al vértice y_0 . Consideremos las aplicaciones:

1. $\varphi : \pi_1(G, x_0) \rightarrow \pi_1(G, y_0)$ dada por $\varphi([\omega]) = [\gamma\omega\gamma^{-1}]$.
2. $\psi : \pi_1(G, y_0) \rightarrow \pi_1(G, x_0)$ definida por $\psi([\beta]) = [\gamma^{-1}\beta\gamma]$.

Es fácil ver que φ y ψ son homomorfismos de grupos y que las composiciones $\psi\varphi$ y $\varphi\psi$ son aplicaciones identidad de $\pi_1(G, x_0)$ y $\pi_1(G, y_0)$ respectivamente, luego los grupos $\pi_1(G, x_0)$ y $\pi_1(G, y_0)$ son isomorfos. \square

Del resultado anterior tenemos que, si G es una gráfica conexa entonces $\pi_1(G, x_0)$ es independiente del vértice x_0 . Luego definimos el *grupo fundamental de G* como $\pi_1(G) = \pi_1(G, x_0)$ para cualquier $x_0 \in G_0$.

Teorema 1.5.2 ([27]) *El grupo fundamental de una gráfica conexa G es un grupo libre.* \square

Capítulo 2

Gráficas químicas

Estudiaremos las gráficas químicas, en particular definiremos algunos invariantes y su relación con propiedades físicas y químicas de la molécula que representan.

2.1. Gráficas químicas

Sea $G = (G_0, G_1)$ una gráfica simple, esto es, G no contiene lazos o aristas múltiples. Diremos que G es una *gráfica química* si G es conexa y $d(x) \leq 4$ para todo $x \in G_0$.

Consideraremos compuestos químicos ó moléculas formadas por carbonos (C) e hidrógenos (H), los llamados *hidrocarburos conjugados*. La valencia del carbono es cuatro, es decir, un átomo de carbono tiene cuatro electrones para formar enlaces con otros átomos para así formar la molécula. En los compuestos que nos interesan tres de estos electrones son llamados σ -electrones y están enlazados a tres átomos distintos de carbonos o hidrógenos y son llamados *enlaces simples*. El cuarto electrón es llamado π -electrón que se enlaza con cualquier carbono, para éste segundo átomo el electrón compartido es también un π -electrón, dando origen a los *enlaces dobles*, es decir, los enlaces dobles son formados por σ -electrones y π -electrones.

El *esqueleto de carbono* de una molécula puede representarse por medio de una gráfica química que se obtiene de la siguiente manera: un vértice por cada átomo de carbono, dos vértices son adyacentes si y sólo si hay un σ -electrón en cada átomo que origina un enlace entre ellos. En la Figura 2.1 vemos un ejemplo de una molécula con su gráfica química asociada.

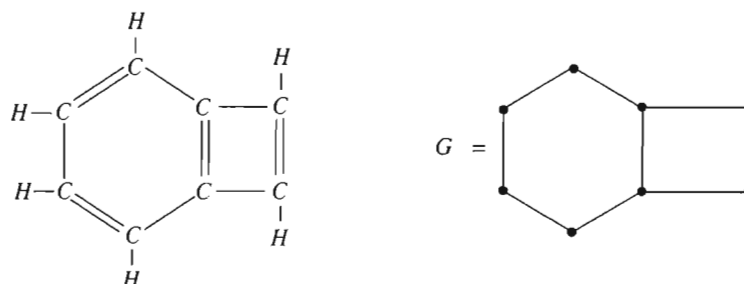


Figura 2.1: Molécula y gráfica química asociada.

Cuando una molécula tiene su gráfica química G bipartita se dice que la *molécula es alternante*. En este caso se sabe que el hecho de que $0 \in \text{Spec}(G)$ es sinónimo de inestabilidad química de la molécula.

2.2. Teoría de Hückel (HMO)

Sea G una gráfica química de un hidrocarburo conjugado, con n vértices, A_G su matriz de adyacencia y espectro $\text{Spec}(G) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, con $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.

La *teoría de Hückel* relaciona los valores propios de la matriz A_G con cantidades físicas químicas asociadas al hidrocarburo conjugado de interés en química.

Recordemos de la sección 2.1 que consideraremos moléculas donde un átomo de carbono tiene cuatro electrones para formar enlaces, donde tres de ellos son llamados σ -electrones y el cuarto es llamado π -electrón.

La ecuación de Schrödinger para G en la teoría de Hückel, ver [12], expresa que:

$$\mathcal{H}_G \Psi_i = E_i \Psi_i$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, donde E_i es un número que representa la energía de un π -electrón del i -ésimo átomo de carbono (i -ésimo vértice en G), Ψ_i es la función onda del π -electrón del i -ésimo átomo de carbono y el *operador Hamiltoniano* o *matriz de Hückel* \mathcal{H}_G está definida por medio de una matriz de tamaño $n \times n$

y coeficientes:

$$\mathcal{H}_{ij} = \begin{cases} \alpha & \text{si } i = j. \\ \beta & \text{si } i \neq j \text{ y existe un enlace (simple o doble)} \\ & \text{entre los átomos } i \text{ y } j. \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases}$$

para $1 \leq i, j \leq n$, donde α y β son valores constantes para todos los hidrocarburos conjugados.

Las matrices \mathcal{H}_G y A_G se relacionan por:

$$\mathcal{H}_G = \alpha I_n + \beta A_G$$

donde I_n es la matriz identidad de tamaño $n \times n$. Por lo tanto la relación entre los niveles de energía de los π -electrones y los valores propios de la matriz de adyacencia viene dada por:

$$E_i = \alpha + \beta \lambda_i \quad (2.1)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

La *energía total de los π -electrones* o *energía π -electrón total*, [14], está definida como:

$$E_\pi = \sum_{i=1}^n g_i E_i, \quad (2.2)$$

donde g_i es el número de π -electrones en el i -ésimo orbital molecular (i -ésimo enlace).

Reemplazando (2.1) en (2.2) tenemos

$$E_\pi = n_e \alpha + \beta \sum_{i=1}^n g_i \lambda_i, \quad (2.3)$$

con n_e el número total de los π -electrones en la molécula.

Para los hidrocarburos conjugados que estamos considerando tenemos (ver [16]):

$$\begin{aligned} g_i &= 2 & \text{si } \lambda_i > 0. \\ g_i &= 0 & \text{si } \lambda_i < 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Aplicando (2.4) en (2.3) tenemos:

$$\begin{aligned}
 E_\pi &= n_e \alpha + \left(2 \sum_{i=1}^{n_e/2} \lambda_i \right) \beta, & \text{si } n_e \text{ es par.} \\
 E_\pi &= n_e \alpha + \left(2 \sum_{i=1}^{(n_e-1)/2} \lambda_i + \lambda_{(n_e+1)/2} \right) \beta, & \text{si } n_e \text{ es impar.}
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

Obtenemos que

$$E_\pi = n_e \alpha + 2 \beta \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i.$$

Como en la diagonal de la matriz de adyacencia A_G los coeficientes son ceros, entonces

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0,$$

así que

$$E_\pi = n_e \alpha + \beta \sum_{i=1}^n |\lambda_i|.$$

Si tomamos como cero de la escala de energía el valor $n_e \alpha$ y expresamos a E_π en unidades de β obtenemos

$$E_\pi = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|.$$

2.3. Invariantes de gráficas químicas

Algunos invariantes que consideraremos para una gráfica química $G = (G_0, G_1)$ con n vértices, m aristas, matriz de adyacencia A_G con espectro $\text{Spec}(G) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ donde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, son los siguientes:

1. La π -energía o energía, definida de la siguiente manera:

$$E_\pi(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|. \tag{2.6}$$

2. El k -ésimo momento espectral, lo definimos como:

$$M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k = \text{tr}(A_G^k). \quad (2.7)$$

3. El 1-índice de conectividad o índice de Randić de la gráfica G viene dado por:

$${}^1\mathcal{X}(G) = \sum_{\{i,j\} \in G_1} \frac{1}{\sqrt{d(i)d(j)}}, \quad (2.8)$$

donde la suma corre sobre las aristas de G y $d(i)$ denota el grado del vértice i .

4. El número de Wiener W viene dado por:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in G_0} d(i,j),$$

donde $d(i,j)$ es la distancia entre los vértices i, j (la longitud de la trayectoria más corta entre i y j).

5. El índice de Hosoya Z , definido como:

$$Z(G) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} P(G, k),$$

donde $P(G, k)$ es el número de maneras en que se puede escoger k aristas no adyacentes en G y $\lfloor n/2 \rfloor$ es la parte entera de $n/2$. Por definición $P(G, 0) = 1$ y es claro que $P(G, 1) = m$.

Para una gráfica bipartita G , se tiene la desigualdad de McClelland, ver [28, 6]:

$$\sqrt{2m + n(n-1)|\det(A_G)|^{2/n}} \leq E_\pi(G) \leq \sqrt{2mn}. \quad (2.9)$$

Para una gráfica G en general se tiene que

$$M_0(G) = n \quad \text{y} \quad M_2(G) = 2m. \quad (2.10)$$

Si G es una gráfica bipartita se tiene que $M_{2k+1}(G) = 0$ para toda k , lo cual es claro por la Proposición 1.1.3.

Para información sobre el índice de Randić, consultar [1, 2, 35, 36].

2.4. Invariantes y propiedades físicas y químicas

2.4.1. π -Energía vs Calores de formación

Calor de formación es la energía necesaria para formar compuesto a partir de sus elementos en condiciones estándar.

La π -energía $E_\pi(G)$ presenta una buena correlación con calores de formación experimentales cuando G es la gráfica química de un hidrocarburo conjugado. En la Figura 2.2 mostramos la correlación entre E_π y calores de formación experimentales para los doce hidrocarburos bencenoides $C_{22}H_{14}$ (hidrocarburos con 22 átomos de carbonos y 14 átomos de hidrógenos), con coeficiente de correlación $r = 0,966$, ver [13].

Los momentos espectrales $M_{2k}(G)$ con $k \geq 0$, están relacionados con la π -energía $E_\pi(G)$ de una gráfica bipartita G (ver [22]) como sigue. Para $x \neq 0$ tenemos que:

$$|x| = \alpha_0 + \alpha_2 x^2 + \alpha_4 x^4 + \alpha_6 x^6 + \dots \quad (2.11)$$

La ecuación (2.11) es truncada y los coeficientes $\alpha_0, \alpha_2, \alpha_4, \dots, \alpha_{2L}$ pueden ser determinados numéricamente. Por lo tanto la π -energía se aproxima como:

$$E_\pi(G)(L) = \sum_{i=0}^L \alpha_{2i} M_{2i}(G) - \alpha_0 \eta(G),$$

donde $\eta(G)$ es la multiplicidad del cero en $\text{Spec}(G)$ y

$$\alpha_0 = \frac{1}{\pi} \frac{6}{2L+1},$$

$$\alpha_{2i} = (-1)^{i+1} \frac{1}{\pi} \frac{2^{2i+1}}{3^{2i-1}} \frac{(L+i)!}{(2L+1)(2i-1)(2i)!(L-i)!}.$$

La expresión truncada $E_\pi(G)(L)$ está definida y converge a $E_\pi(G)$ cuando $L \rightarrow \infty$.

2.4.2. Índice de Randić vs Punto de ebullición

Punto de ebullición es la temperatura necesaria para que una sustancia pase de estado líquido a estado gaseoso. Si G es la gráfica química de un compuesto alcano (G es un árbol), se tiene que el índice de Randić ${}^1\mathcal{X}(G)$ tiene una fuerte correlación con el punto de ebullición y la estabilidad de la molécula que representa G , ver [29].

En la Tabla 2.1 ([19]) mostramos los valores del punto de ebullición (PE) y los invariantes índice de Randić ${}^1\mathcal{X}$, número de Wiener W e índice de Hosoya Z , de los 19 alcanos comprendido entre C_4H_{10} y C_7H_{16} . En la Figura 2.3 mostramos la correlación con $r = 0,994$, del punto de ebullición PE con el índice de Randić ${}^1\mathcal{X}$ de los 19 alcanos enlistados en la Tabla 2.1, ver [19].

Relaciones entre ${}^1\mathcal{X}$, W y PE , ver [29], algunas son:

$${}^1\mathcal{X} = A_R + B_R \cdot (6W)^{1/3} + C_R \cdot (6W)^{-1/3} + \dots,$$

donde $A_R = \sqrt{2} - 3/2 = -0,009$, $B_R = 1/2$, $C_R = 1/6 = 0,17, \dots$

Se tiene también $PE = -146,2 + 64,87 \cdot W^{1/3}$.

2.5. Gráficas kekuléanas

Se dice que una gráfica química G es *kekuléana* si tiene al menos una subgráfica generadora (contiene todos los vértices de G) tal que cada vértice tiene grado uno, tal subgráfica es llamada *subgráfica de Kekulé*. En teoría de gráficas una subgráfica de Kekulé es llamada *1-factor*.

El número de subgráficas de Kekulé de una gráfica G la denotaremos por $K = K(G)$, si $K(G) = 0$ diremos que la gráfica química G es *no-kekuléana*. Es claro que K es un invariante de G . Sea \mathcal{K} el conjunto de todas las subgráficas de Kekulé de una gráfica química kekuléana G , es claro que $K(G) = |\mathcal{K}|$.

Si un hidrocarburo conjugado tiene su gráfica química kekuléana ($K > 0$), el número K es llamado *el número de estructura de Kekulé* del hidrocarburo. Según [41], K representa el número de formas en que se alternan los enlaces simples y dobles entre los átomos de carbonos. En la Figura 2.4 vemos que el número de estructuras de Kekulé del benceno es $K = 2$.

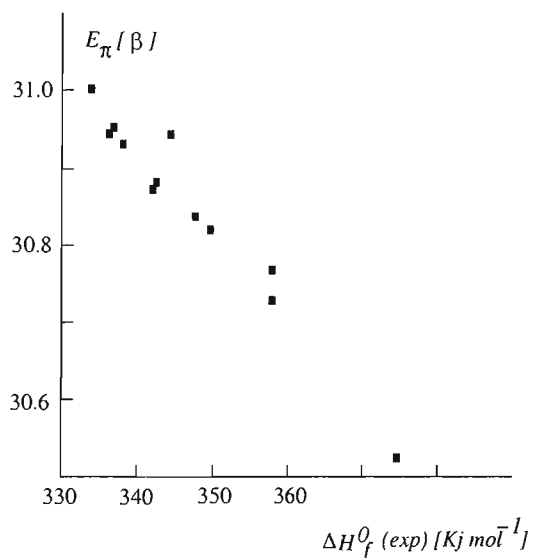


Figura 2.2: π -energía E_{π} versus calores de formación experimentales para los 12 hidrocarburos benzenoides con 22 átomos de carbonos y 14 átomos de hidrógenos ($C_{22}H_{14}$), con $\beta = -97,0Kjmol^{-1}$.

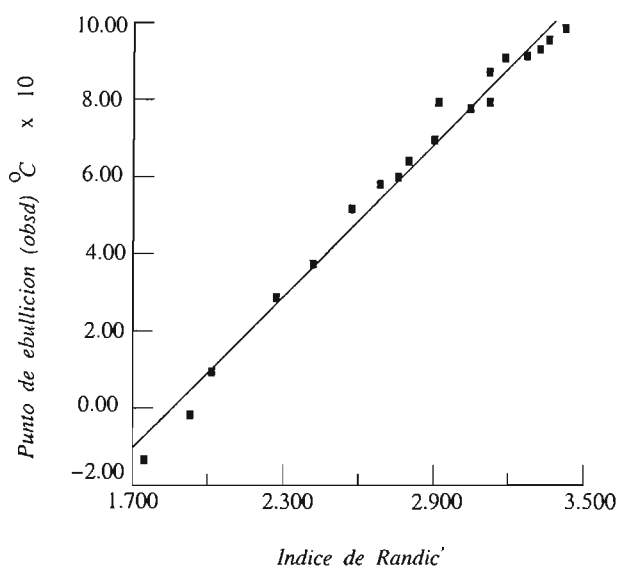


Figura 2.3: Punto de ebullición ($^{\circ}C$) versus el índice de Randić para los hidrocarburos alcanos comprendidos entre C_4H_{10} y C_7H_{16} .

Molécula.	PE (obsd) $^{\circ}C$	${}^1\mathcal{X}$	W	Z
2-metilpropano	-11.73	1.732	9	4
n -butano	-0.50	1.914	10	5
2,2-dimetilpropano	9.50	2.000	16	5
2-metilbutano	27.85	2.270	18	7
n -pentano	36.07	2.414	20	8
2,2-dimetilbutano	49.74	2.561	28	9
2,3-dimetilbutano	57.99	2.643	29	10
2-metilpentano	60.27	2.770	32	11
3-metilpentano	63.28	2.808	31	12
n -hexano	68.74	2.914	35	13
2,2-dimetilpentano	79.20	3.061	46	14
2,4-dimetilpentano	80.50	3.126	48	15
2,2,3-trimetilbutano	80.88	2.943	42	13
3,3-dimetilpentano	86.03	3.121	44	16
2,3-dimetilpentano	89.78	3.181	46	17
2-metilhexano	90.05	3.270	52	18
3-metilhexano	91.85	3.308	50	19
3-etilpentano	93.48	3.346	48	20
n -heptano	98.42	3.414	56	21

Cuadro 2.1: Valores de los invariantes gráficos ${}^1\mathcal{X}$, W , Z y punto de ebullición PE de las gráficas químicas asociadas a los 19 hidrocarburos alcanos comprendidos entre C_4H_{10} y C_7H_{16} .

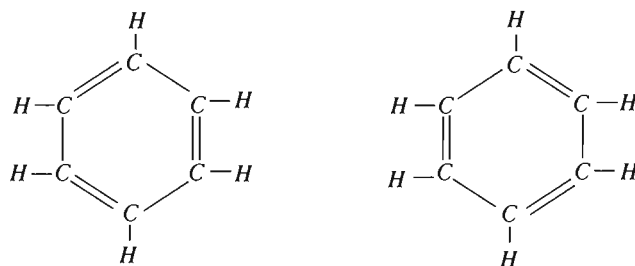


Figura 2.4: Valencia de Kekulé del benceno, $K = 2$.

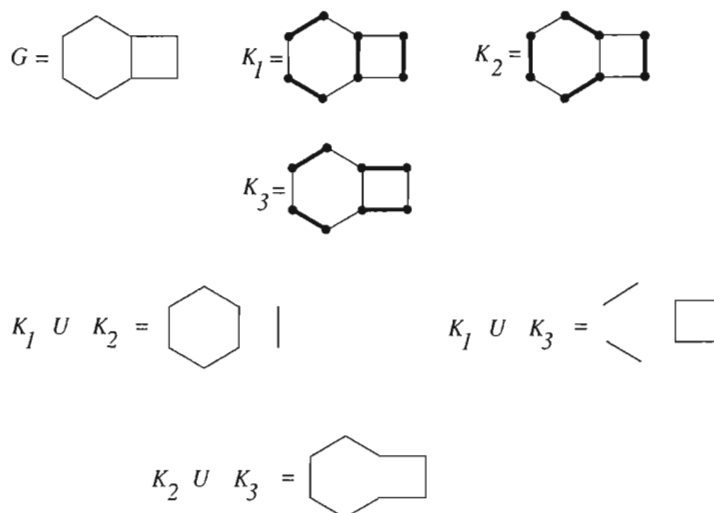


Figura 2.5: Gráfica química y sus subgráficas de Kekulé.

Sean K_1 y K_2 dos elementos distintos en \mathcal{K} , diremos que K_1 y K_2 son de la *misma paridad* si la unión de los conjuntos de aristas de dichas subgráficas forman un número par de ciclos de longitud $4t$ para $t = 1, 2, \dots$, (para más detalles al respecto consultar [6] sección 8.2 y [41] vol II). En la Figura 2.5 vemos la gráfica química G del benzociclobutadieno y las tres subgráficas de Kekulé K_1, K_2 y K_3 (con las aristas más negras), donde K_1 y K_2 son de la misma paridad.

De acuerdo a la definición anterior, la relación sobre el conjunto \mathcal{K} dada por: *ser de la misma paridad*, es una relación de equivalencia, el cual subdivide a \mathcal{K} en dos clases de equivalencia \mathcal{K}_1 y \mathcal{K}_2 . Sean $K_+ = |\mathcal{K}_1|$ y $K_- = |\mathcal{K}_2|$, es claro que

$$K = K_+ + K_-.$$

Para el ejemplo de la Figura 2.5 se tiene que $K_+ = 2$ y $K_- = 1$.

El determinante de la matriz A_G de una gráfica G con n vértices, está relacionado con K_+ y K_- , ver [6, 41], como sigue:

$$\det(A_G) = (-1)^{n/2}(K_+ - K_-)^2, \quad (2.12)$$

llamada la *fórmula de Dewar Longuet-Higgins*.

Capítulo 3

Sistemas hexagonales

Introducimos los sistemas hexagonales y definimos el complejo CW de un sistema hexagonal. Demostraremos que el único sistema hexagonal en \mathbb{R}^3 orientable y sin frontera es el toro.

3.1. Sistemas hexagonales

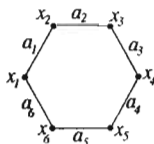
Un *sistema hexagonal* $G = (G_0, G_1, \mathcal{H}(G))$ está dado por un conjunto finito de vértices G_0 , un conjunto de aristas $G_1 \subset G_0^2$ y un conjunto $\mathcal{H}(G) \subset G_1^6$ de hexágonos, cumpliendo:

(H1) cada arista $a = \{x, y\} \in G_1$, cumple que $x \neq y$ y pertenece a un hexágono (esto es, existe $a' \in G_1^5$ con $(a, a') \in \mathcal{H}(G)$).

(H2) cada vértice $x \in G_0$, pertenece a lo más a tres aristas en G (esto es, el grado $d(x) \leq 3$).

(H3) cada hexágono $\{a_1, a_2, \dots, a_6\} \in \mathcal{H}(G)$ está formado por pares diferentes de aristas con $a_i \cap a_{i+1}$ un vértice común de a_i y a_{i+1} para $i = 1, 2, \dots, 6$ y $a_7 = a_1$. Más aún, dos hexágonos son disjuntos o tienen una arista en común.

Escribiremos $\{a_1, a_2, \dots, a_6\}$ para elementos de $\mathcal{H}(G)$ y obtenemos el dibujo:



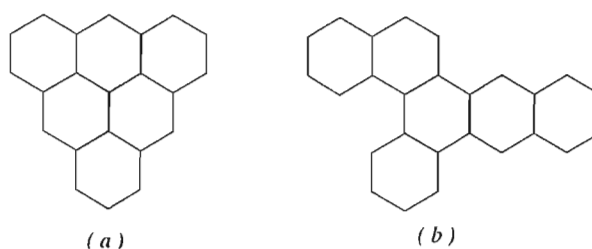


Figura 3.1: Gráficas bencenoides.

Observemos que no necesariamente para cualquier sextupla

$$\{a_1, a_2, \dots, a_6\} \in G_1^6$$

es un hexágono en G , ver Figura 3.2 (b).

Ejemplos de sistemas hexagonales tenemos:

1. Sistema hexagonal plano. Estos sistemas lo llamaremos gráficas bencenoides y representan la gráficas químicas de los hidrocarburos bencenoides, ver Figura 3.1. Haremos un estudio detallado de estas gráficas en el capítulo 4.
2. Sistema hexagonal cilíndrico. Estos sistemas representan las gráficas químicas de los nanotubos de carbono, ver Figura 3.2, en (a) G se obtiene identificando los vértices con el mismo número, el cilindro G tiene $n \geq 0$ medias vueltas y lo llamaremos n -cilindro. Si las medias vueltas están en dirección opuesta decimos que es $(-n)$ -cilindro. Si n es impar el sistema hexagonal es llamado n -banda de Möbius.
3. Sistema hexagonal cónico abierto. Estos sistemas representan las gráficas químicas de los nanoconos de carbono, ver Figura 3.3: G se obtiene identificando los vértices con el mismo número y es llamado un n -cono. Si las medias vueltas están en la dirección opuesta, entonces G es un $(-n)$ -cono. En el caso que n es impar, decimos que G es una n -cono de Möbius.
4. Sistema hexagonal tórico, ver Figura 3.4.
5. Sistema hexagonal anudado, ver Figura 3.5.

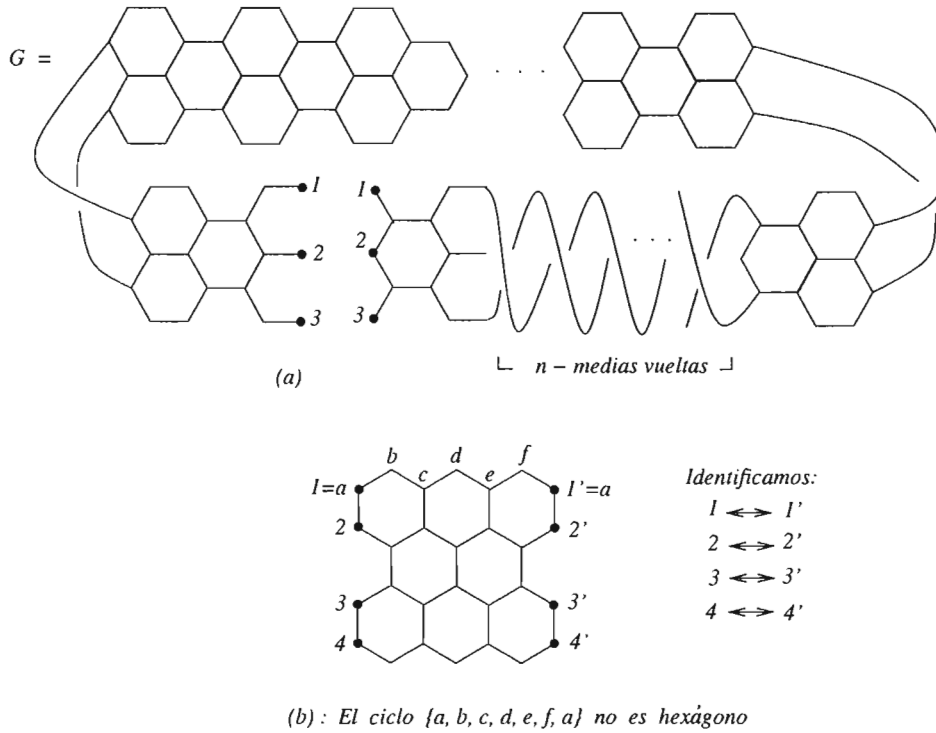


Figura 3.2: Un ejemplo de sistema hexagonal cilíndrico.

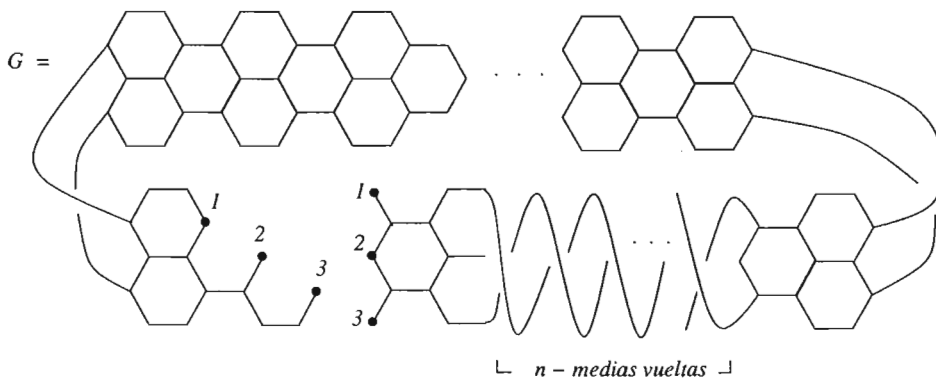


Figura 3.3: Un ejemplo de sistema hexagonal cónico.

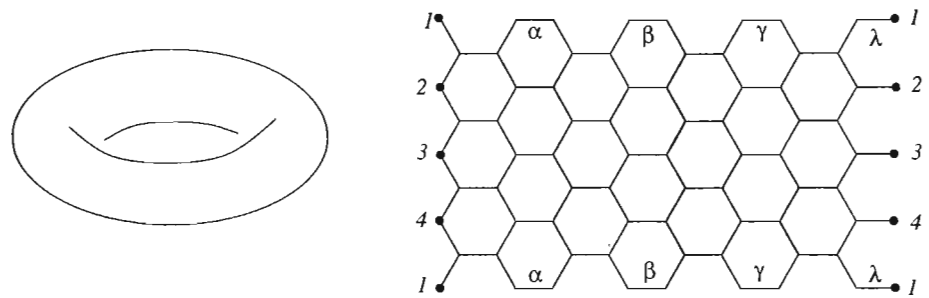


Figura 3.4: Sistema hexagonal tórico (identificamos los vértices y aristas con la misma etiqueta).

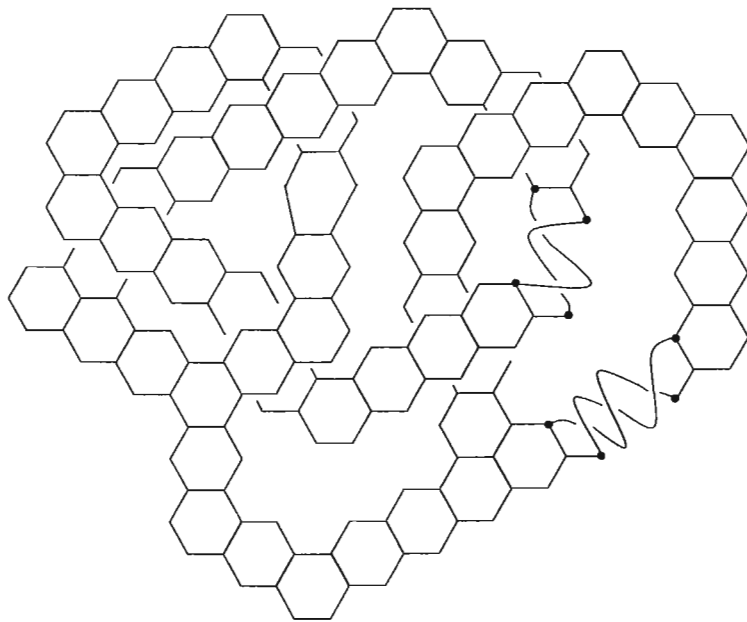


Figura 3.5: Sistema hexagonal anudado.

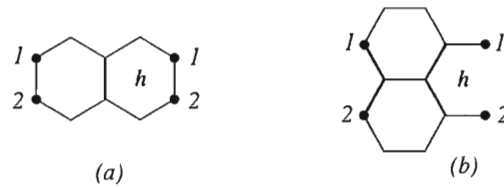


Figura 3.6: (a) y (b) no son sistemas hexagonales.

Si G es un n -cilindro o un n -cono para algún $n \geq 0$, diremos que G es una n -configuración cónica. Se dice que un sistema hexagonal G tiene *frontera* si tiene al menos un vértice de grado dos. Dado un sistema hexagonal G , consideraremos una inmersión $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$.

Las gráficas (a) y (b) de la Figura 3.6 que se obtienen al identificar los vértices con el mismo número no son sistemas hexagonales ya que hexágonos adyacentes comparten dos aristas.

3.2. Complejo CW de un sistema hexagonal

Asociamos a un sistema hexagonal G con una inmersión $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ un complejo CW (ver [27]), que denotaremos por $C(\xi)$ cuyos n -esqueletos están dados por:

1. 0-esqueleto es el conjunto $\{ \xi(x) : x \in G_0 \}$.
2. 1-esqueleto es el conjunto $\{ \xi(a) : a \in G_1 \}$.
3. 2-esqueleto es el conjunto de las funciones diferenciables:

$$\{ m_h : [0, 1]^2 \hookrightarrow \mathbb{R}^3 : h \text{ hexágono en } G \},$$

y cumpliendo: $\partial(m_h([0, 1]^2)) = m_h(\partial([0, 1]^2)) = \xi(h)$ para cada hexágono h en G y las membranas $m_{h_i} : [0, 1]^2 \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ correspondiente a los hexágonos adyacentes h_i para $i = 1, 2$ sólo puede intersectarse en la frontera.

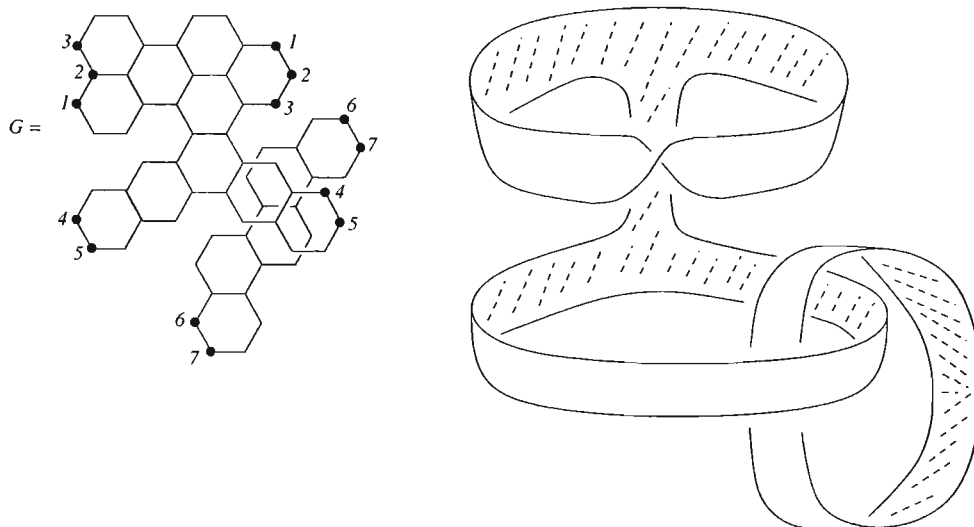


Figura 3.7: Complejo CW asociado a un sistema hexagonal G .

La Figura 3.7, muestra un sistema hexagonal (identificando los vértices del mismo número) y su complejo CW asociado con dos componentes conexas entrelazadas.

Diremos que un sistema hexagonal G con una inmersión $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ es *orientable* si su complejo CW asociado $C(\xi)$ es orientable, esto es, existe un campo vectorial diferenciable $\Omega : C(\xi) \rightarrow \mathbb{R}^3 - \{0\}$.

Proposición 3.2.1 *Sea G un sistema hexagonal. G es orientable si y sólo si G no contiene como subgráfica inducida una banda de Möbius.*

Demostración:

Es bien conocido que una banda de Möbius no es orientable. Por lo tanto $C(\xi)$ no es orientable si G contiene como subgráfica inducida a una banda de Möbius.

Supongamos que G no es orientable. Podemos dar a $C(\xi)$ una estructura suave donde un campo vectorial Ω está bien definido sobre cada membrana $C(\xi)_h$ con h hexágono de G , ver Figura 3.8 (a).

Ya que no podemos extender Ω a un campo vectorial sobre $C(\xi)$, entonces existe una trayectoria γ cerrada sobre $C(\xi)$ donde Ω no puede estar bien definida.

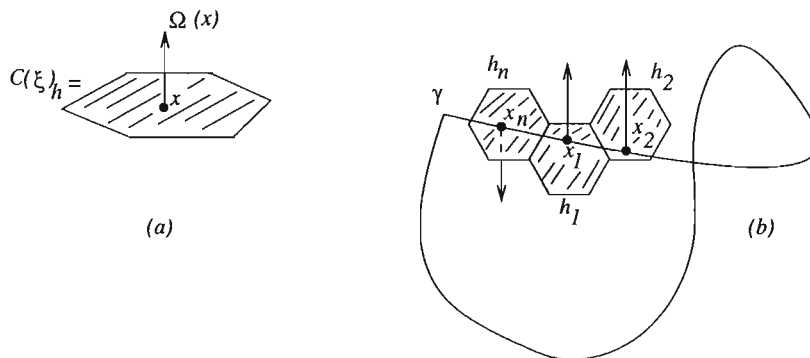


Figura 3.8:

Escogemos puntos x_1, x_2, \dots, x_n sobre γ tales que las membranas:

$$C(\xi)_{h_1}, C(\xi)_{h_2}, \dots, C(\xi)_{h_n}$$

asociadas a los hexágonos h_1, h_2, \dots, h_n en G cubran a la trayectoria γ y $x_i \in C(\xi)_{h_i}$ para $i = 1, 2, \dots, n$, ver Figura 3.8 (b). Sea M la subgráfica inducida de G definida por los hexágonos h_1, h_2, \dots, h_n ; claramente M es una n -banda de Möbius para algún entero impar n . \square

Claramente un sistema hexagonal plano es orientable definiendo el campo vectorial Ω constante. En lo que sigue trabajaremos con sistemas hexagonales orientables.

Proposición 3.2.2 *Sea G un sistema hexagonal sin frontera, con $n(G)$ vértices, $m(G)$ aristas y $h(G)$ hexágonos. Entonces*

$$h(G) + n(G) - m(G) = 0.$$

Demostración:

Como G no tiene frontera, entonces todos sus vértices son de grado tres. Luego por el Teorema 1.1.1 tenemos que $3n(G) = 2m(G)$. Ya que cada arista está en dos hexágonos y cada vértice está en tres hexágonos, entonces $3n(G) = 6h(G) = 2m(G)$. Por lo tanto

$$h(G) + n(G) - m(G) = \frac{1}{3}m(G) + \frac{2}{3}m(G) - m(G) = 0.$$

\square

Sabemos de la topología que cualquier superficie compacta orientable M es homeomorfa a la esfera o al toro con n agujeros para $n \geq 1$, ver [27]. La *función característica de Euler* de la superficie M dada una subdivisión de M en polígonos viene definida por:

$$\mathcal{X}(M) = (\text{número de vértices}) - (\text{número de aristas}) + (\text{número de caras}),$$

y se tiene que:

$$\mathcal{X}(M) = \begin{cases} 2 & \text{si } M \text{ es una esfera.} \\ 2 - 2n & \text{si } M \text{ es un toro con } n \text{ agujeros.} \end{cases} \quad (3.1)$$

Proposición 3.2.3 *El único sistema hexagonal G sin frontera y orientable es el toro.*

Demostración:

Sea $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ una inmersión de un sistema hexagonal G sin frontera y orientable. Consideremos el complejo CW asociado $C(\xi)$ del sistema G con $\xi(G)$ una subdivisión en polígonos de $C(\xi)$. Luego $C(\xi)$ es una superficie compacta sin frontera, orientable y con función característica de Euler:

$$\mathcal{X}(C(\xi)) = h(G) + n(G) - m(G),$$

con $h(G)$ número de hexágonos, $n(G)$ número de vértices y $m(G)$ número de aristas.

Por la Proposición 3.2.2 tenemos que $\mathcal{X}(C(\xi)) = 0$ y por (3.1) se tiene que $C(\xi)$ es un toro con un agujero. \square

Capítulo 4

Gráficas bencenoides

Haremos un estudio detallado de los sistemas hexagonales planos que llamaremos **gráficas bencenoides**. Como referencias generales para estas gráficas, recomendamos ver, [7, 11, 14, 41].

4.1. Gráficas bencenoides

Una *gráfica bencenoide* es una gráfica plana conexa obtenida de hexágonos regulares, tales que, dos hexágonos son disjuntos o tiene una arista en común. Las gráficas bencenoides representan las gráficas químicas de los hidrocarburos bencenoides.

Una arista en una gráfica bencenoide se dice *arista externa* si sólo pertenece a un hexágono. Un vértice se dice *vértice externo* si hay una arista que incide en él que es externa. El *perímetro* o la *frontera* de una gráfica bencenoide está formado por las aristas externas y los vértices externos. Los *vértices internos* de una gráfica bencenoide son aquellos que no están en el perímetro; denotaremos por n_i el total de vértices internos de una gráfica bencenoide.

Una gráfica bencenoide se dice *catacondensada* si $n_i = 0$, y *pericondensada* si $n_i > 0$. En la Figura 3.1 tenemos que (a) es una gráfica bencenoide pericondensada y (b) una gráfica bencenoide catacondensada. Una gráfica bencenoide catacondensada se dice *cadena bencenoide* si cada hexágono es adyacente a lo más a dos hexágonos.

Denotaremos por n , m y h los números totales de vértices, aristas y hexágonos de una gráfica bencenoide respectivamente.

Por medio de una inducción sobre el número de hexágonos h en una gráfica bencenoide se prueba lo siguiente:

$$n + n_i = 4h + 2, \quad (4.1)$$

$$m + n_i = 5h + 1,$$

y de las ecuaciones (4.1) se obtiene que

$$h = m - n + 1. \quad (4.2)$$

Denotaremos por n_2 el número total de vértices de grado dos y por n_3 el número total de vértices de grado tres. Se tienen las siguientes ecuaciones:

$$n = n_2 + n_3 \quad (4.3)$$

$$2m = 2n_2 + 3n_3,$$

la última ecuación es debido al Teorema 1.1.1.

De (4.3) tenemos:

$$n_3 = 2m - 2n \quad (4.4)$$

$$n_2 = 3n - 2m,$$

y de las ecuaciones (4.2) y (4.4) obtenemos

$$n_3 = 2(h - 1). \quad (4.5)$$

Sobre el perímetro de una gráfica bencenoide G definimos las *entradas* de G como:

1. *fisura*: camino de longitud dos que pasa por un vértice de grado dos seguido de un vértice de grado tres y terminando en un vértice de grado dos.
2. *bahía*: camino de longitud tres empezando en un vértice de grado dos, seguido por dos vértices de grado tres y terminando en un vértice de grado dos.
3. *cueva*: camino de longitud cuatro empezando en un vértice de grado dos, seguido por tres vértices de grado tres y terminando en un vértice de grado dos.

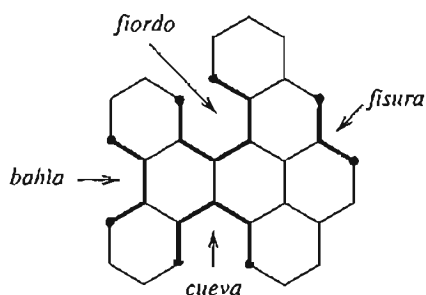


Figura 4.1: Entradas de una gráfica bencenoide.

4. *fiordo*: camino de longitud cinco empezando en un vértice de grado dos, seguido por cuatro vértices de grado tres y terminando en un vértice de grado dos.

En la Figura 4.1 ilustramos las entradas de una gráfica bencenoide.

Denotaremos por f , B , C y F los números totales de fisuras, bahías, cuevas y fiordos respectivamente de una gráfica bencenoide G , el *número total de entradas* de G viene dado por:

$$\tau = f + B + C + F. \quad (4.6)$$

El número $b = B + 2C + 3F$ es llamado *región bahía* de una gráfica bencenoide G .

Es claro que

$$n_3 = n_3^P + n_4, \quad (4.7)$$

donde n_3^P es el número de vértices de grado tres sobre el perímetro de la gráfica bencenoide y obviamente se cumple:

$$\begin{aligned} n_3^P &= f + 2B + 3C + 4F \\ &= \tau + b. \end{aligned} \quad (4.8)$$

De las ecuaciones (4.1), (4.5) y (4.8) la ecuación (4.7) se puede expresar

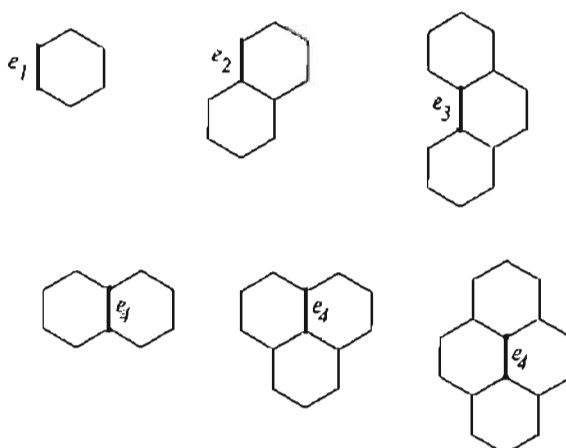


Figura 4.2: Tipos de aristas de una gráfica bencenoide.

como:

$$\begin{aligned}
 r &= 2(h-1) - n_i - b \\
 &= (4h + 2 - n_i) - 2h - 4 - b \\
 &= n - 2h - 4 - b.
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

En una gráfica bencenoide se tienen tres tipos de aristas. Aristas uniendo vértices de grado dos e_1 , uniendo vértices de grado dos con vértices de grado tres e_2 y uniendo vértices de grado tres e_3 ó e_4 , ver Figura 4.2.

Sea m_{22} el total de aristas de tipo e_1 , m_{23} el total de aristas de tipo e_2 y m_{33} el total de aristas e_3 y e_4 . Luego el número total de aristas se expresa como $m = m_{22} + m_{23} + m_{33}$.

Lema 4.1.1 ([35]) *Sea G una gráfica bencenoide con n vértices, h hexágonos y número total de entradas r (ecuación (4.6)). Entonces*

$$m_{22} = n - 2h - r + 2,$$

$$m_{23} = 2r,$$

$$m_{33} = 3h - r - 3.$$

□

Veremos algunas relaciones de los valores m_{22} , m_{23} y m_{33} que se deducen usando la ecuación (4.9) y el Lema 4.1.1 y que usaremos en la sección 4.4.3.

$$\begin{aligned} m_{22} &= b + 6. \\ m_{23} &= 2n - 4h - 2b - 8. \\ m_{33} &= b + 6h - m. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Otras propiedades sobre la estructura de una gráfica bencenoide son:

1. Todo ciclo en una gráfica bencenoide es de longitud par. Así que las gráficas bencenoides son bipartitas.
2. Un ciclo de longitud $4q$ para $q \geq 1$, tiene un número impar de vértices en su interior.
3. Un ciclo de longitud $4q + 2$ para $q \geq 1$, tiene un número par de vértices en su interior.

Para consultar más sobre gráficas bencenoides, ver [11, 12].

4.2. Número de estructuras de Kekulé de gráficas bencenoides

Recordemos de la sección 2.5 que $K = K(G)$ es el número de subgráficas de Kekulé de una gráfica química G Kekuléana.

En Gutman [14] se tiene:

Teorema 4.2.1 *Las gráficas bencenoides catacondensadas con h hexágonos son gráficas kekuléanas y*

$$h + 1 \leq K \leq \begin{cases} 3^{h/2} & \text{si } h \text{ es par} \\ 2 \cdot 3^{(h-1)/2} & \text{si } h \text{ es impar} \end{cases} \tag{4.11}$$

donde la igualdad en la cota inferior se da en el caso de la cadena lineal L_h con h hexágonos, ver Figura 4.3. \square

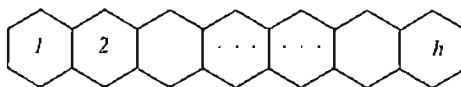


Figura 4.3: Cadena lineal con h hexágonos.

Se tiene que para una gráfica bencenoide G todas sus subgráficas de Kekulé son de la misma paridad (sección 2.5), ver [6]. Así obtenemos que $K_+ = K(G)$ y $K_- = 0$. Luego tenemos el siguiente resultado:

Teorema 4.2.2 ([6]) *Si G es una gráfica bencenoide kekuléana ($K(G) > 0$), con n vértices y matriz de adyacencia A_G , entonces*

1. $\det(A_G) = (-1)^{n/2} K(G)^2$.
2. $\eta(G) = 0$, donde $\eta(G)$ está dada en la sección 1.2. □

En la Figura 4.4 mostramos la gráfica catacondensada G del hidrocarburo benzoantraceno, el cual por el Teorema 4.2.1 es kekuléana. Si A_G es la matriz de adyacencia de G , se tiene que $\det(A_G) = -49$ por lo tanto $K(G) = 7$ por el Teorema 4.2.2. En la Figura 4.4 vemos las siete subgráficas de Kekulé (las aristas más negras) K_i para $i = 1, 2, \dots, 7$ de la gráfica G .

Para conocer más detalles sobre estructura kekuléana en gráficas bencenoides consultar a Cyvin - Gutman [7].

4.3. Índice de Randić de gráficas bencenoides

El índice de Randić (sección 2.3) para una gráfica bencenoide G viene dado por:

$${}^1\chi(G) = \frac{m_{22}}{2} + \frac{m_{23}}{\sqrt{6}} + \frac{m_{33}}{3}.$$

donde m_{22} el total de aristas de tipo e_1 (ver Figura 4.2), m_{23} el total de aristas e_2 y m_{33} el total de aristas e_3 y e_4 .

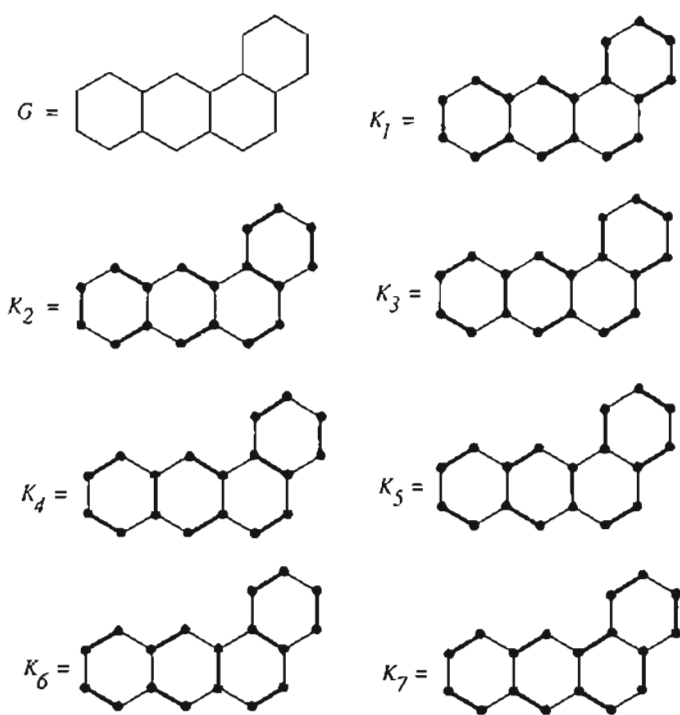


Figura 4.4: Gráfica bencenoide con sus subgráficas de Kekulé.

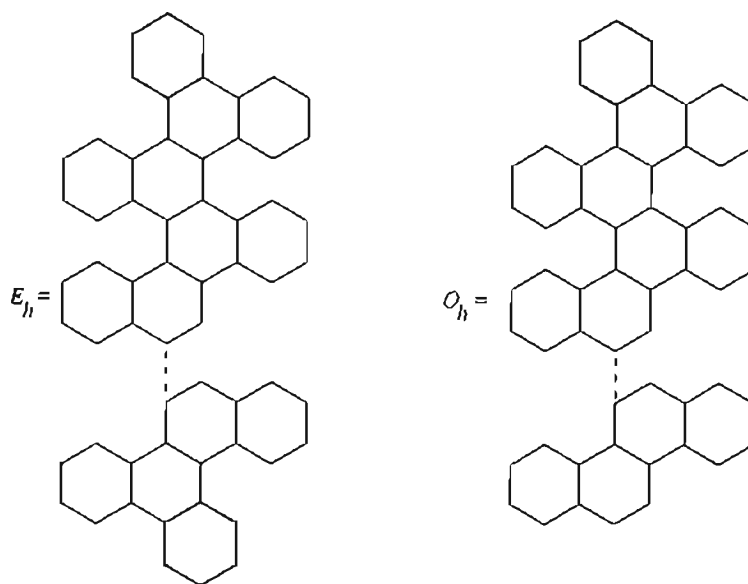


Figura 4.5: Gráficas bencenoides catacondensadas.

Usando el Lema 4.1.1, expresamos el índice de Randić para gráficas bencenoides en función del número total de vértices n y número total de entradas r como sigue:

Teorema 4.3.1 ([35]) *Sea G una gráfica bencenoide con n vértices y número total de entradas r . Entonces*

$${}^1\chi(G) = \frac{n}{2} - \frac{5 - 2\sqrt{6}}{6} r.$$

□

Sea \mathbf{C}_h el conjunto de las gráficas bencenoides catacondensadas con h hexágonos.

Proposición 4.3.2 ([36]) *Para todo $T \in \mathbf{C}_h$*

$${}^1\chi(L_h) \leq {}^1\chi(T) \leq \begin{cases} {}^1\chi(E_h) & \text{si } h \text{ es par.} \\ {}^1\chi(O_h) & \text{si } h \text{ es impar,} \end{cases}$$

donde L_h es la cadena lineal con h hexágonos, (ver Figura 4.3) y las gráficas catacondensadas E_h y O_h se muestran en la Figura 4.5. □

En las siguientes secciones de este capítulo haremos un estudio detallado de los momentos espectrales $M_{2k}(G)$ para $2 \leq k \leq 6$, con G una gráfica bencenoide, basados en los trabajos [22, 23, 24, 25] y cuyas técnicas las usaremos en el capítulo 5.

4.4. Momento espectral de una gráfica bencenoide

Consideraremos G una gráfica bencenoide con A_G su matriz de adyacencia y espectro $Spec(G) = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$.

Recordemos de la sección 2.3 que el k -ésimo momento espectral de G está definido como:

$$M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k = \sum_{i=1}^n (A_G^k)_{ii}. \quad (4.12)$$

De la Proposición 1.1.2 se tiene que $M_k(G)$ es el total de caminos cerrados de longitud k en la gráfica G , luego podemos escribir:

$$M_k(G) = \sum_{C_k} 1, \quad (4.13)$$

donde la suma corre sobre los caminos cerrados C_k de longitud k en G .

Consideraremos G una gráfica bencenoide, estudiaremos los momentos espectrales $M_{2k}(G)$ con $0 \leq k \leq 6$.

El momento $M_{2k}(G)$ es expresado como:

$$M_{2k}(G) = M'_{2k}(G) + M''_{2k}(G), \quad (4.14)$$

donde el momento $M'_{2k}(G)$ es generado por subgráficas árboles contenidas en G y el momento $M''_{2k}(G)$ es generado por subgráficas no árboles contenidas en G que producen caminos cerrados de longitud $2k$ en G . Es claro que (4.14) es válido para cualquier gráfica bipartita.

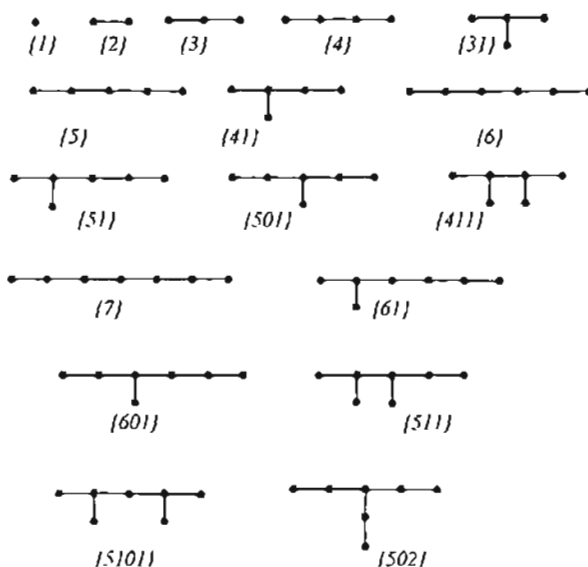


Figura 4.6: Gráficas árboles con grado máximo tres hasta número total de vértices $n = 7$.

4.4.1. Momento espectral de gráfica bencenoide generado por subgráficas árboles.

Sea G una gráfica bencenoide. En la Figura 4.6 mostramos las subgráficas árboles de G con grado máximo tres y hasta número total de vértices $n = 7$ que se usan en los $M'_{2k}(G)$ para $0 \leq k \leq 6$, la notación para estas subgráficas es tomada de [25].

De [25] se tiene que:

$$M'_{2k}(G) = \sum_{G' \subseteq G} C_{2k}^{G'} N_{G'}, \quad (4.15)$$

donde G' representa una subgráfica árbol inducida de G con número de aristas $\leq k$, $N_{G'}$ es el número de subgráficas inducidas de G que son isomorfas a G' y $C_{2k}^{G'}$ enumera el total de caminos cerrados de longitud $2k$ generados por la subgráfica G' (usan cada aristas de G').

Las siguientes proposiciones se encuentran sin demostración en [25].

Proposición 4.4.1 *Sea T un árbol con total de aristas $\leq k$, entonces*

$$C_{2k}^T = M_{2k}(T) - \sum_s M_{2k}(T-s) + \sum_{s,s'} M_{2k}(T-s-s') - \sum_{s,s',s''} M_{2k}(T-s-s'-s'') + \dots \quad (4.16)$$

donde s, s', s'', \dots son vértices de grado uno en T , y $T-s$ indica la gráfica T sin el vértice s .

Demostración:

Supongamos que T tiene n_1 vértices de grado uno. Por (4.13), el lado derecho de (4.16) se puede escribir como:

$$\sum_{i=0}^{n_1} \sum_{C_{2k,n_1-i}} \left(1 - \sum_{s: C_{2k,n_1-i} \subset T-s} 1 + \sum_{s,s': C_{2k,n_1-i} \subset T-s-s'} 1 - \sum_{s,s',s'': C_{2k,n_1-i} \subset T-s-s'-s''} 1 + \dots \right), \quad (4.17)$$

donde los C_{2k,n_1-i} representan caminos cerrados de longitud $2k$ conteniendo $n_1 - i$ vértices de grado uno. Luego (4.17) es igual a:

$$\sum_{i=0}^{n_1} \sum_{C_{2k,n_1-i}} \left(1 - \binom{i}{1} + \binom{i}{2} - \binom{i}{3} + \dots \right) = \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{C_{2k,n_1-i}} (1-1)^i = \sum_{C_{2k,n_1}} 0^0 = \sum_{C_{2k,n_1}} 1, \quad (4.18)$$

donde la última suma de (4.18) corre sobre los caminos cerrados C_{2k,n_1} de longitud $2k$ con n_1 vértices de grado uno, luego los C_{2k,n_1} son caminos cerrados de longitud $2k$ generados por T , por lo tanto la última suma de (4.18) nos da C_{2k}^T . \square

Veamos algunos valores de C_{2k}^T usando la Proposición 4.4.1 con T mostrada en la Figura 4.6 y que son dados en [25].

Tenemos que:

$$C_{2k}^{\{1\}} = 1 \quad \text{y} \quad C_{2k}^{\{2\}} = 2.$$

Se tiene que:

$$C_{2k}^{\{3\}} = M_{2k}(\{3\}) - 2M_{2k}(\{2\}),$$

pero la potencia $2k$ -ésima de la matriz de adyacencia $A_{\{3\}}$ tiene la forma:

$$A_{\{3\}}^{2k} = \begin{pmatrix} 2^{k-1} & 0 & 2^{k-1} \\ 0 & 2^k & 0 \\ 2^{k-1} & 0 & 2^{k-1} \end{pmatrix},$$

luego obtenemos que $C_{2k}^{\{3\}} = 2^{k+1} - 2^2$.

Si $G = \{31\}$, se tiene que la $2k$ -ésima potencia de la matriz de adyacencia $A_{\{31\}}$ es:

$$A_{\{31\}}^{2k} = \begin{pmatrix} 3^{k-1} & 0 & 3^{k-1} & 3^{k-1} \\ 0 & 3^k & 0 & 0 \\ 3^{k-1} & 0 & 3^{k-1} & 3^{k-1} \\ 3^{k-1} & 0 & 3^{k-1} & 3^{k-1} \end{pmatrix},$$

así que $C_{2k}^{\{31\}} = M_{2k}(\{31\}) - 3M_{2k}(\{3\}) + 3M_{2k}(\{2\}) = 6(3^{k-1} - 2^k + 1)$ para $k \geq 3$.

Si $G = \{4\}$ tenemos que:

$$C_{2k}^{\{4\}} = 6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1) - 2(2^{k+1} - 1),$$

donde

$$g_k(a_1, a_2) = \sum_{r=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} \binom{k-r}{r} (-1)^r a_1^{k-2r} a_2^r, \quad (4.19)$$

con $\lfloor k/2 \rfloor$ la parte entera de $k/2$.

De manera análoga obtenemos expresiones para C_{2k}^T para T tales como:

$$\{5\}, \{41\}, \{51\}, \{501\}, \{411\}.$$

Para $k \geq 4$ se tiene:

$$C_{2k}^{\{5\}} = 12(2 \cdot 3^{k-2} - \frac{3}{2}(3^{k-3} - 1) - 1) - 4 \\ - 2(6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1)) + 2^{k+1}.$$

$$C_{2k}^{\{41\}} = 8(3g_{k-2}(4, 2) - 2g_{k-3}(4, 2)) - 2(6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1)) \\ - 2 \cdot 3^k + 3 \cdot 2^{k+1} - 2.$$

Se obtiene para $k \geq 5$ lo siguiente:

$$\begin{aligned} C_{2k}^{\{51\}} &= 10(g_{k-1}(5, 5) - 2g_{k-2}(5, 5)) \\ &\quad - 24(2 \cdot 3^{k-2} - \frac{3}{2}(3^{k-3} - 1) - 1) + 8 \\ &\quad - 8(3g_{k-2}(4, 2) - 2g_{k-3}(4, 2)) \\ &\quad + 3(6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1)) - 2^{k+1}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{2k}^{\{501\}} &= 2(3(g_{k-1}(4, 1) + g_{k-2}(4, 1)) - (g_{k-2}(4, 1) + g_{k-3}(4, 1))) \\ &\quad - 16(3g_{k-2}(4, 2) - 2g_{k-3}(4, 2)) \\ &\quad - 12(2 \cdot 3^{k-2} - \frac{3}{2}(3^{k-3} - 1) - 1) + 4 \\ &\quad + 2(6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1)) + 2 \cdot 3^k - 2^{k+1}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{2k}^{\{411\}} &= 12(3 \cdot 4^{k-2} - \frac{4}{3}(4^{k-3} - 1) - 1) - 2 \\ &\quad - 32(3g_{k-2}(4, 2) - 2g_{k-3}(4, 2)) + 4 \cdot 3^k \\ &\quad + 4(6g_{k-1}(3, 1) - 4g_{k-2}(3, 1)) - 4 \cdot 2^{k+1} + 2. \end{aligned}$$

Proposición 4.4.2 ([25]) *Sea T una gráfica árbol con k aristas y grado máximo tres, entonces*

$$C_{2k}^T = (2k)2^{n_3}$$

donde n_3 es el número total de vértices de grado tres en T .

Demostración:

Como T tiene k aristas, entonces cada camino cerrado de longitud $2k$ generado por T pasa dos veces por cada arista.

Cada vértice de grado tres origina dos posibilidades para formar un camino cerrado de longitud $2k$ generado por T . Por lo tanto

$$\begin{aligned} C_{2k}^T &= n_1 \cdot 2^{n_3} + 2 n_2 \cdot 2^{n_3} + 3 n_3 \cdot 2^{n_3} \\ &= (n_1 + 2 n_2 + 3 n_3) \cdot 2^{n_3}, \end{aligned}$$

donde n_i es el total de vértices de grado i con $i \leq 3$. Luego por el Teorema 1.1.1 tenemos que $C_{2k}^T = (2k)2^{n_3}$. \square

Por lo tanto, los momentos espectrales $M'_{2k}(G)$ para $0 \leq k \leq 6$ usando (4.15) viene dados por:

$$M'_0(G) = N_{\{1\}}.$$

$$M'_2(G) = 2N_{\{2\}}.$$

$$M'_4(G) = 2N_{\{2\}} + 4N_{\{3\}}.$$

$$M'_6(G) = 2N_{\{2\}} + 12N_{\{3\}} + 6N_{\{4\}} + 12N_{\{31\}}.$$

$$M'_8(G) = 2N_{\{2\}} + 28N_{\{3\}} + 32N_{\{4\}} + 72N_{\{31\}} + 8N_{\{5\}} + 16N_{\{41\}}. \quad (4.20)$$

$$M'_{10}(G) = 2N_{\{2\}} + 60N_{\{3\}} + 120N_{\{4\}} + 300N_{\{31\}} + 60N_{\{5\}} + 140N_{\{41\}} + 10N_{\{6\}} + 20N_{\{51\}} + 20N_{\{501\}} + 40N_{\{411\}}.$$

$$M'_{12}(G) = 2N_{\{2\}} + 124N_{\{3\}} + 390N_{\{4\}} + 1080N_{\{31\}} + 300N_{\{5\}} + 804N_{\{41\}} + 96N_{\{6\}} + 216N_{\{51\}} + 228N_{\{501\}} + 504N_{\{411\}} + 12N_{\{7\}} + 24N_{\{61\}} + 24N_{\{601\}} + 48N_{\{511\}} + 48N_{\{5101\}} + 24N_{\{502\}}.$$

4.4.2. Momento espectral de gráfica bencenoide generado por subgráficas no árboles

Podemos obtener el momento $M''_{2k}(G)$ (ecuación (4.14)) de manera análoga como $M'_{2k}(G)$ (ecuación (4.15)). Luego

$$M''_{2k}(G) = \sum_{G'' \subseteq G} C_{2k}^{G''} N_{G''}, \quad (4.21)$$

donde G'' es una subgráfica no árbol inducida de G , $N_{G''}$ es el número de subgráficas inducidas en G que son isomorfas a G'' y $C_{2k}^{G''}$ enumera el total de caminos cerrados de longitud $2k$ generados por G'' .

En la Figura 4.7 ilustramos las subgráficas cíclicas de G que se usan en los momentos $M''_{2k}(G)$ para $3 \leq k \leq 6$. La notación usada para estas subgráficas es tomada de [24].

Los momentos espectrales $M''_{2k}(G)$ para $3 \leq k \leq 6$ están dados en [24] y se expresan como:

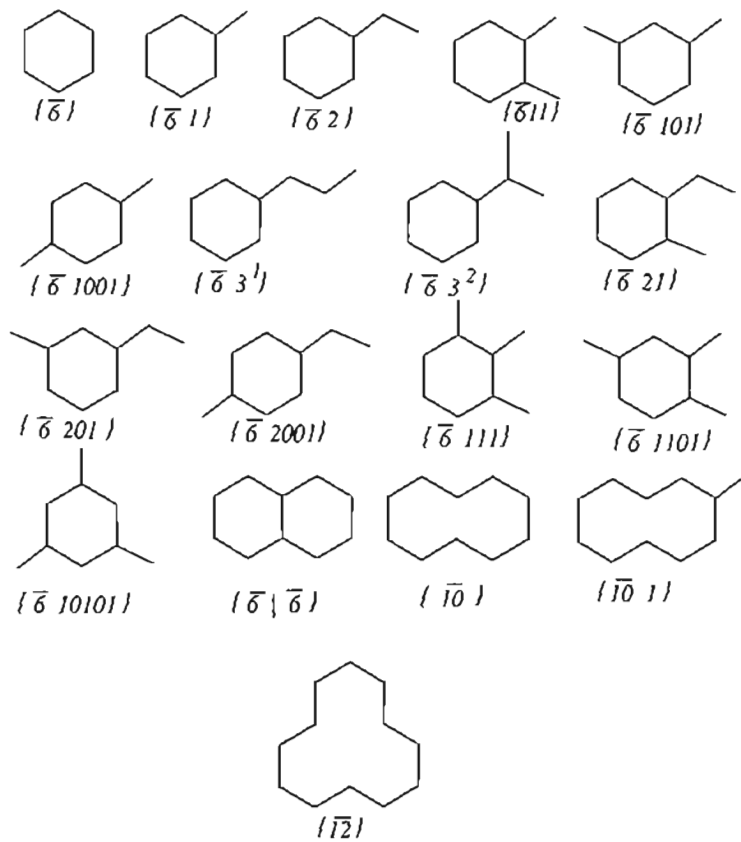


Figura 4.7: Algunas subgráficas no árboles en gráficas bencenoides.

$$M_6''(G) = 12N_{\{\bar{6}\}}.$$

$$M_8''(G) = 96N_{\{\bar{6}\}} + 16N_{\{\bar{6}1\}}.$$

$$M_{10}''(G) = 540N_{\{\bar{6}\}} + 180N_{\{\bar{6}1\}} + 20N_{\{\bar{6}2\}} + 20N_{\{\bar{6}11\}} \\ + 20N_{\{\bar{6}101\}} + 20N_{\{\bar{6}1001\}} + 20N_{\{\bar{10}\}}. \quad (4.22)$$

$$M_{12}''(G) = 2724N_{\{\bar{6}\}} + 1344N_{\{\bar{6}1\}} + 264N_{\{\bar{6}2\}} + 312N_{\{\bar{6}11\}} \\ + 288N_{\{\bar{6}101\}} + 288N_{\{\bar{6}1001\}} + 240N_{\{\bar{10}\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}31\}} + 48N_{\{\bar{6}32\}} + 24N_{\{\bar{6}21\}} + 24N_{\{\bar{6}201\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}2001\}} + 24N_{\{\bar{6}111\}} + 24N_{\{\bar{6}1101\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}10101\}} + 72N_{\{\bar{6}\bar{6}\}} + 24N_{\{\bar{10}1\}} + 24N_{\{\bar{12}\}}.$$

Determinamos los momentos espectrales $M_{2k}(G) = M'_{2k}(G) + M''_{2k}(G)$ para $2 \leq k \leq 6$ con G una gráfica bencenoide usando las ecuaciones (4.20) y (4.22), obteniendo:

$$M_4(G) = 2N_{\{2\}} + 4N_{\{3\}}.$$

$$M_6(G) = 2N_{\{2\}} + 12N_{\{3\}} + 6N_{\{4\}} + 12N_{\{31\}} + 12N_{\{\bar{6}\}}.$$

$$M_8(G) = 2N_{\{2\}} + 28N_{\{3\}} + 32N_{\{4\}} + 72N_{\{31\}} \\ + 8N_{\{5\}} + 16N_{\{41\}} + 96N_{\{\bar{6}\}} + 16N_{\{\bar{6}1\}}.$$

$$M_{10}(G) = 2N_{\{2\}} + 60N_{\{3\}} + 120N_{\{4\}} + 300N_{\{31\}} \\ + 60N_{\{5\}} + 140N_{\{41\}} + 10N_{\{6\}} + 20N_{\{51\}} \\ + 20N_{\{501\}} + 40N_{\{411\}} + 540N_{\{\bar{6}\}} + 180N_{\{\bar{6}1\}} + 20N_{\{\bar{6}2\}} \\ + 20N_{\{\bar{6}11\}} + 20N_{\{\bar{6}101\}} + 20N_{\{\bar{6}1001\}} + 20N_{\{\bar{10}\}}. \quad (4.23)$$

$$M_{12}(G) = 2N_{\{2\}} + 124N_{\{3\}} + 390N_{\{4\}} + 1080N_{\{31\}} \\ + 300N_{\{5\}} + 804N_{\{41\}} + 96N_{\{6\}} + 216N_{\{51\}} \\ + 228N_{\{501\}} + 504N_{\{411\}} + 12N_{\{7\}} + 24N_{\{61\}} \\ + 24N_{\{601\}} + 48N_{\{511\}} + 48N_{\{5101\}} + 24N_{\{502\}} \\ + 2724N_{\{\bar{6}\}} + 1344N_{\{\bar{6}1\}} + 264N_{\{\bar{6}2\}} + 312N_{\{\bar{6}11\}} \\ + 288N_{\{\bar{6}101\}} + 288N_{\{\bar{6}1001\}} + 240N_{\{\bar{10}\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}31\}} + 48N_{\{\bar{6}32\}} + 24N_{\{\bar{6}21\}} + 24N_{\{\bar{6}201\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}2001\}} + 24N_{\{\bar{6}111\}} + 24N_{\{\bar{6}1101\}} \\ + 24N_{\{\bar{6}10101\}} + 72N_{\{\bar{6}\bar{6}\}} + 24N_{\{\bar{10}1\}} + 24N_{\{\bar{12}\}}.$$

4.4.3. Momentos $M_4(G)$ y $M_6(G)$ para gráficas bencenoides

Sea G una gráfica bencenoide con n vértices, m aristas, h hexágonos, B bahías, C cuevas y F fiordos. Es claro que:

$$\begin{aligned} N_{\{2\}} &= m \\ N_{\{31\}} &= n_3 = 2m - 2n \quad \text{por (4.4).} \\ N_{\{\bar{6}\}} &= h = m - n + 1 \quad \text{por (4.2).} \end{aligned} \tag{4.24}$$

Sea v el vértice de grado dos de la subgráfica $\{3\}$ (ver Figura 4.6), entonces v es de grado dos o tres en G . Si v es de grado dos en G , entonces se tendrá una sólo vez la subgráfica $\{3\}$ en la gráfica G . Si v es de grado tres en G , se tendrán tres maneras distintas la subgráfica $\{3\}$ en G . Luego

$$N_{\{3\}} = n_2 + 3n_3, \tag{4.25}$$

recordemos que n_2 denota el número total de vértices de grado dos y n_3 el total de vértices de grado tres en G .

Si v y w son los vértices de grado dos en la subgráfica $\{4\}$ (ver Figura 4.6), consideremos los siguientes casos:

1. Si v, w son de grado dos en G , entonces la arista $\alpha = \{v, w\}$ es de tipo e_1 (ver Figura 4.2) y obtenemos de una manera la subgráfica $\{4\}$.
2. Si v es de grado dos y w de grado tres, la arista $\alpha = \{v, w\}$ es de tipo e_2 y obtenemos de dos maneras distintas la subgráfica $\{4\}$ en G .
3. Si v es de grado tres y w de grado dos, estamos en el caso anterior.
4. Si v y w son de grado tres, entonces la arista $\alpha = \{v, w\}$ es de tipo e_3 ó e_4 y tendremos de cuatro maneras distintas la subgráfica $\{4\}$ en G .

Entonces

$$N_{\{4\}} = m_{22} + 2m_{23} + 4m_{33}, \tag{4.26}$$

recordemos que m_{22} denota el total de aristas de tipo e_1 , m_{23} el total de aristas de tipo e_2 y m_{33} el total de aristas de tipo e_3 y e_4 .

Reemplazando las ecuaciones dadas en (4.10) (sección 4.1) en (4.26) tenemos:

$$\begin{aligned}
 N_{\{4\}} &= b + 6 + 2(2n - 4h - 2b - 8) + 4(b + 6h - m) \\
 &= 4n - 8h - 16 + 24h - 4m + b + 6 \\
 &= 4n + 16(m - n + 1) - 16 - 4m + b + 6 \quad \text{por (4.2).} \\
 &= 12m - 12n + b + 6.
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

Podemos escribir los momentos $M_4(G)$ y $M_6(G)$ para gráficas bencenoides de las ecuaciones (4.23) en función de n , m y b , usando las ecuaciones (4.24), (4.25) y (4.27) obteniendo lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 M_4(G) &= 2m + 4(n_2 + 3n_3) \\
 &= 2m + 4(4m - 3n) \quad \text{por (4.4).}
 \end{aligned}$$

$$M_4(G) = 18m - 12n.$$

$$\begin{aligned}
 M_6(G) &= 2m + 12(n_2 + 3n_3) + 6(12m - 12n + b + 6) + 12n_3 + 12h \\
 &= 2m + 12(4m - 3n) + 6(12m - 12n + b + 6) + 12(2m - 2n) + \\
 &\quad 12(m - n + 1) \quad \text{por (4.4) y (4.2).}
 \end{aligned}$$

$$M_6(G) = 158m - 144n + 48 + 6b.$$

Para los momentos espectrales $M_8(G)$, $M_{10}(G)$ y $M_{12}(G)$ de gráficas bencenoides, en función de n , m , B , C , F y otros parámetros consultar [23].

4.5. Cota del momento espectral $M_6(G)$ para gráficas bencenoides catacondensadas

En esta sección obtendremos algunos resultados nuevos con respecto al momento $M_6(G)$ con G una gráfica bencenoide.

Usando el Lema 4.1.1 en (4.26) obtenemos que:

$$\begin{aligned}
 N_{\{4\}} &= n - 2h - r + 2 + 2(2r) + 4(3h - r - 3) \\
 &= n + 10h - 10 - r \\
 &= n + 5(2(h - 1)) - r \\
 &= n + 5n_3 - r \quad \text{por (4.5).} \\
 &= n + 10m - 10n - r \quad \text{por (4.4).} \\
 &= 10m - 9n - r.
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

Reemplazando la expresión de $N_{\{4\}}$ de (4.28) junto con (4.24) y (4.25) en la ecuación (4.23) para el momento $M_6(G)$, obtenemos una fórmula alternativa para $M_6(G)$ con G una gráfica bencenoide que viene dada por:

$$M_6(G) = 146m - 126n + 12 - 6r. \tag{4.29}$$

Tenemos el siguiente resultado:

Proposición 4.5.1 Sean G y G' dos gráficas bencenoides con igual número de vértices y aristas, por $r(G)$ denotaremos el número total de entradas de la gráfica G . Entonces $M_6(G) = M_6(G')$ si y sólo si $r(G) = r(G')$. Más aún, si $r(G) \geq r(G')$, entonces $M_6(G) \leq M_6(G')$.

Demostración:

Por (4.29), tenemos el resultado. \square

Por \mathbf{C}_h (sección 4.3) denotamos el conjunto de las gráficas bencenoides catacondensadas con h hexágonos, por (4.1) tenemos las siguientes ecuaciones para $T \in \mathbf{C}_h$

$$m(T) = 5h + 1. \tag{4.30}$$

$$n(T) = 4h + 2.$$

Luego reemplazando éstos valores en la ecuación (4.29) obtenemos el momento $M_6(T)$ para $T \in \mathbf{C}_h$ de la siguiente forma:

$$M_6(T) = 226h - 94 - 6r. \tag{4.31}$$

En [36] se tiene que para todo $T \in \mathbf{C}_h$,

$$\begin{cases} r(E_h) = \frac{h}{2} + 1 & \text{si } h \text{ es par} \\ r(O_h) = \frac{h+1}{2} + 1 & \text{si } h \text{ es impar} \end{cases} \leq r(T) \leq r(L_h) = 2(h-1) \quad (4.32)$$

donde L_h es la cadena lineal catacondensada, ver Figura 4.3 y las gráficas catacondensadas E_h y O_h son dadas en la Figura 4.5.

Proposición 4.5.2 *Para todo $T \in \mathbf{C}_h$ se tienen las siguientes cotas, inferior y superior, para el momento $M_6(T)$:*

$$214h - 82 \leq M_6(T) \leq \begin{cases} 223h - 100 & \text{si } h \text{ es par} \\ 223h - 103 & \text{si } h \text{ es impar} \end{cases}$$

Demostración

Por (4.29) y (4.32) se tiene el resultado. \square

4.6. π -energía y momento espectral

Los resultados de esta sección han sido publicados en [33]. Consideraremos $G = (G_0, G_1)$ una gráfica bipartita con n vértices, m aristas, A_G su matriz de adyacencia y como en la sección 1.2 $E_\pi(G)$ la π -energía de G .

Gutman [15], obtuvo una cota inferior para $E_\pi(G)$ con G una gráfica bencenoide, que viene dada por:

$$\left(\frac{16}{27}\right)^{1/2} \sqrt{2mn} \leq E_\pi(G). \quad (4.33)$$

En [33] obtuvimos una mejor cota inferior para la π -energía de gráficas bencenoides que la dada en (4.33) y que veremos más adelante. Pero antes necesitamos algunos resultados.

Lema 4.6.1 *Sean a_1, a_2, \dots, a_n números reales positivos y definimos*

$$x_k = \sum_{i=1}^n a_i^k, \quad \text{para } k \geq 1.$$

Entonces:

1. si $t + s = 2k$, entonces $x_t x_s \geq x_k^2$. La igualdad se cumple si y sólo si $a_i = a_j$ para todo $1 \leq i, j \leq n$ ó $t = s$.
2. $n x_{2k} \geq x_k^2$. La igualdad se cumple si y sólo si $a_i = a_j$ para todo $1 \leq i, j \leq n$.
3. $x_k^2 \geq x_{2k} + n(n-1) \left(\prod_{i=1}^n a_i \right)^{2k/n}$.

Demostración:

1. Se tiene que

$$x_k^2 = \left(\sum_{i=1}^n a_i^k \right)^2 = \sum_{i=1}^n a_i^{2k} + \sum_{i \neq j} a_i^k a_j^k$$

$$x_t x_s = \left(\sum_{i=1}^n a_i^t \right) \left(\sum_{j=1}^n a_j^s \right) = \sum_{i=1}^n a_i^{t+s} + \sum_{i \neq j} a_i^t a_j^s.$$

Supongamos que $s \leq t$, como se cumple la desigualdad:

$$\left(a_i^{(k-s)} - a_j^{(k-s)} \right)^2 \geq 0;$$

entonces se obtiene que

$$a_i^t a_j^s + a_j^t a_i^s \geq 2 a_i^k a_j^k.$$

Por lo tanto tenemos que $x_k^2 \leq x_t x_s$.

La igualdad se cumple sólo cuando $a_i^{k-s} = a_j^{k-s}$ para todo $i \neq j$.

2. Es claro ya que

$$0 \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_i^k - a_j^k)^2 = 2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{i=1}^n a_i^{2k} \right) - 2 \sum_{i,j} a_i^k a_j^k = 2n x_{2k} - 2x_k^2$$

y la igualdad se cumple sólo cuando $a_i^k = a_j^k$ para todo $i \neq j$.

La prueba de 3. puede ser vista en [6] 8.7. □

Para $k \geq 1$, definimos la gráfica $G^{(k)}$, con conjunto de vértices $G_0^{(k)} = G_0$ y $a_{ij}^{(k)}$ aristas entre los vértices i y j , donde $a_{ij}^{(k)}$ es el número de camino de longitud k en G entre los vértices i y j . Llamaremos $G^{(k)}$ la gráfica k -derivada de G . Tenemos que la matriz de adyacencia de $G^{(k)}$ es A_G^k .

Lema 4.6.2 Sea G una gráfica bipartita y $k \geq 1$ un número impar.

1. La gráfica $G^{(k)}$ es bipartita.
2. Para cualquier $s \geq 1$, el momento espectral $M_s(G^{(k)}) = M_{sk}(G)$.

Demostración:

1. Sean $b : \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{0, 1\}$ la función bipartición para la gráfica G y

$$x_1 - x_2 - x_3 - \dots - x_k - x_{k+1}$$

una trayectoria de longitud $k \geq 1$. Si $b(x_1) = b(x_{k+1})$, entonces k es par.

2. Ya que A_G^k es la matriz de adyacencia de $G^{(k)}$, entonces los valores propios de $G^{(k)}$ son $\lambda_1^k, \dots, \lambda_n^k$ donde los $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ son los valores propios de A_G , entonces

$$M_s(G^{(k)}) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i^k)^s = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{sk} = M_{sk}(G).$$

□

Denotaremos por $E^{(k)}$ la π -energía de la gráfica k -derivada de G .

Proposición 4.6.3 Sea G una gráfica bipartita con n vértices, m aristas, π -energía $E = E_\pi(G)$ y momento espectral M_s , para $s \geq 1$. Sea k un número impar, supongamos que $2k = r + s$ para algunos números pares $r, s \geq 2$. Entonces

1. $E^{(k)} \leq \sqrt{M_r M_s}$.
2. Si $k + 1 = 2q$ para algún número par q , entonces

$$M_q^2 \leq EE^{(k)} \quad \text{y} \quad M_q^2 (M_r M_s)^{-1/2} \leq E.$$

Demostración:

Consideremos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ los valores propios de la matriz A_G . Aplicando el Lema 4.6.1 para los números reales positivos $a_i = |\lambda_i|$ para $1 \leq i \leq n$ y

$$x_s = \sum_{i=1}^n a_i^s, \text{ obtenemos}$$

1. $(E^{(k)})^2 = x_k^2 \leq x_r x_s = M_r M_s.$

2. $M_q^2 = x_q^2 \leq x_1 x_k = EE^{(k)}.$

□

Corolario 4.6.4 *Sea G como antes, entonces*

$$2\sqrt{2} m \sqrt{\frac{m}{M_4}} \leq E.$$

Demostración:

Aplicamos el resultado anterior tomando $k = 3, \tau = 2, s = 4, q = 2$, luego tenemos

$$M_2^2 \left(M_2 M_4 \right)^{-1/2} = M_2 \left(\frac{M_2}{M_4} \right)^{1/2},$$

y por (2.10) tenemos el resultado. \square

La cota inferior para la π -energía de gráficas bencenoides usando el Corolario anterior es mejor que la dada por (4.33), como sigue

Corolario 4.6.5 *Sea G una gráfica bencenoide, entonces*

$$\left(\frac{16}{27} \right)^{1/2} \sqrt{2nm} \leq E_\pi(G).$$

Demostración:

Para el caso de una gráfica bencenoide se tiene que $M_4 = 18m - 12n$ y consideremos $d = \frac{2m}{n}$ el promedio del grado de los vértices. Por el Corolario 4.6.4 tenemos

$$E_\pi(G) \geq 2\sqrt{2m} \frac{m}{\sqrt{M_4}} = 2\sqrt{2m} \frac{\binom{nd}{2}}{\sqrt{9nd - 12n}} = \sqrt{2mn} \frac{d}{\sqrt{9d - 12}}$$

Para n fija, el valor de d para que la función $\frac{d}{\sqrt{9d-12}}$ alcance su mínimo es $d_0 = \frac{8}{3}$, entonces $\frac{d_0}{\sqrt{9d_0-12}} = \frac{4}{\sqrt{27}}$. \square

4.7. π -energía y estructura de Kekulé

Consideremos G una gráfica bencenoide con $\text{Spec}(G) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ su espectro. Recordemos de la sección 2.5 que $K = K(G)$ es el número de subgráficas de Kekulé de G , por el Teorema 4.2.2 la desigualdad de McClelland (2.9) puede ser escrita como:

$$\sqrt{2m + n(n-1)K^{4/n}} \leq E_\pi(G) \leq \sqrt{2mn}.$$

Proposición 4.7.1 ([33]) *Sea G una gráfica bencenoide kekuléana ($K > 0$). Entonces lo siguiente se cumple para cualquier número k*

$$1. \quad M_k^2 \geq M_{2k} + n(n-1)K^{4k/n}.$$

$$2. \quad K \leq \left(\frac{1}{n}M_k\right)^{n/2k}.$$

$$3. \quad nK^{2/n} \leq E_\pi(G).$$

$$\text{con } M_k = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^k.$$

Demostración:

1. Es el Lema 4.6.1 parte 3.

2. Por 1. y Lema 4.6.1 parte 2. se tiene que

$$M_k^2 \geq M_{2k} + n(n-1)K^{4k/n} \geq \frac{1}{n}M_k^2 + n(n-1)K^{4k/n},$$

luego obtenemos

$$\frac{n-1}{n}M_k^2 \geq n(n-1)K^{4k/n}.$$

3. Aplicamos 2. con $k = 1$. □

Corolario 4.7.2 *Si G es una gráfica bencenoide catacondensada con h hexágonos y n vértices, entonces*

$$n(h+1)^{2/n} \leq E_\pi(G).$$

Demostración:

Sabemos del Teorema 4.2.1 que $h+1 \leq K$ y por la Proposición anterior parte 3. se tiene lo que queremos. □

Gráfica	$(\frac{16}{27})^{1/2}\sqrt{2nm}$	$2\sqrt{2m}\sqrt{\frac{m}{M_1}}$	$E_\pi(G)$
(1)	30.90726871	31.12576116	36.15597200
(2)	30.90726871	31.12576116	36.66238861
(3)	30.90726871	31.12576116	36.72851949
(4)	29.81423970	29.99999999	34.88676220
(5)	28.72087897	28.87580241	34.16438890
(6)	26.53299832	26.63263593	30.80976902

Cuadro 4.1: Comparando las cotas del Corolario 4.6.4 y (4.33) para $E_\pi(G)$ de gráficas bencenoides G .

4.8. Ejemplo

Usando las gráficas bencenoides de la Figura 4.8, observamos que la cota dada en el Corolario 4.6.4 es mejor que la cota dada por Gutman (4.33) para la π -energía de gráfica bencenoide, como vemos en la Tabla 4.1.

Para las gráficas catacondensadas (1) – (3) se tiene que la cota dada por el Corolario 4.7.2 es

$$n(h+1)^{2/n} = 30,19818835.$$

Para la gráfica $G = (5)$ se tiene que $\det(A_G) = 400$, así que $K(G) = 20$ y la cota dada en la Proposición 4.7.1 parte 3. es

$$nK(G)^{2/n} = 30,80565221$$

la cual es mejor que la cota dada por el Corolario 4.6.4.

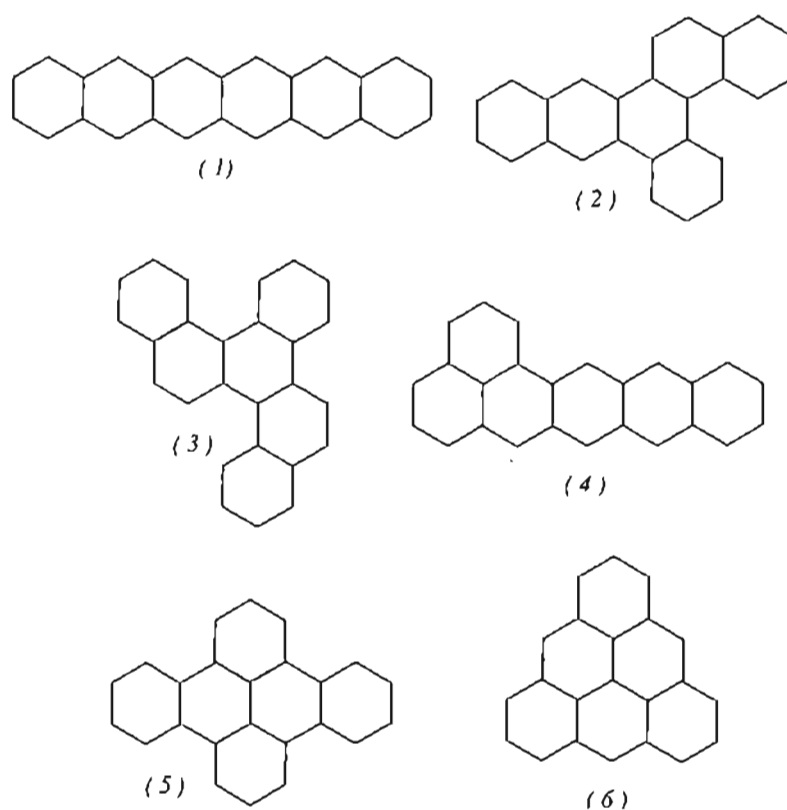


Figura 4.8: Gráficas bencenoides.

Capítulo 5

Sistemas hexagonales orientables

Estudiaremos los sistemas hexagonales en \mathbb{R}^3 orientables, como su grupo fundamental, rango del grupo fundamental. Veremos también la cubierta universal y los invariantes asociados a un sistema hexagonal en \mathbb{R}^3 . Los resultados demostrados en este capítulo son las contribuciones nuevas a la teoría de los sistemas hexagonales en el espacio tres dimensional.

5.1. Grupo fundamental de un sistema hexagonal

Sea G un sistema hexagonal conexo con (s, e) una orientación en las aristas de G (sección 1.1) fija a lo largo de esta sección.

Fijemos x_0 un vértice de G . Definimos el *grupo fundamental de G con base x_0* y que denotaremos por $\pi_1(G, x_0)$ como el grupo cociente del grupo $W(G, x_0)$ de los caminos cerrados dirigidos de x_0 a x_0 (con $\tau_{x_0} = (x_0|x_0)$ el camino cerrado de longitud cero de x_0 a x_0 como su elemento identidad y el producto de caminos como en (1.2) sección 1.1) por medio de la relación de equivalencia \sim llamada *homotopía* dada por:

1. Si $a = \{x, y\} = \{s(a), e(a)\}$ es arista en G , entonces $a a^{-1} \sim \tau_{e(a)}$ y $a^{-1} a \sim \tau_{s(a)}$.
2. Para un hexágono h en G :

$$x_1 \xrightarrow{a_1} x_2 \xrightarrow{a_2} x_3 \xrightarrow{a_3} x_4 \xrightarrow{a_4} x_5 \xrightarrow{a_5} x_6 \xrightarrow{a_6} x_1,$$

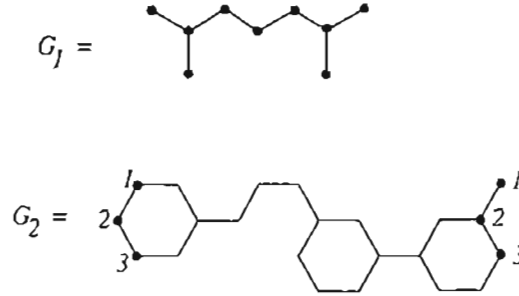


Figura 5.1: Sistemas hexagonales generalizados.

se tiene que:

$$a_i^{\epsilon_i} a_{i+1}^{\epsilon_{i+1}} \cdots a_6^{\epsilon_6} a_1^{\epsilon_1} \cdots a_{i-1}^{\epsilon_{i-1}} \sim \tau_x,$$

para toda $i = 1, 2, \dots, 6$ y $\epsilon_j = \pm 1$ de acuerdo a la orientación de la arista a_j .

- Si $u \sim v$ por medio de 1. y 2., entonces $www' \sim wwv'$ para todos los caminos que tiene sentido multiplicar.

Podemos escribir

$$\pi_1(G, x_0) = \{ [\omega] : \omega \text{ es camino cerrado de } x_0 \text{ a } x_0 \}.$$

De la Proposición 1.5.1 tenemos que, si G es conexo entonces $\pi_1(G, x_0)$ es independiente del vértice x_0 . Luego definimos el *grupo fundamental del sistema hexagonal* G como $\pi_1(G) = \pi_1(G, x_0)$.

Decimos que un sistema $G = (G_0, G_1, \mathcal{H}(G))$ es un *sistema hexagonal generalizado*, si G cumple las condiciones (H2) y (H3) de la definición de un sistema hexagonal (sección 3.1). Un sistema hexagonal es un caso particular de un sistema hexagonal generalizado. La Figura 5.1, muestra ejemplos de sistemas hexagonales generalizados.

Teorema 5.1.1 Sean G un sistema hexagonal conexo con $\xi : G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ una inmersión de G en \mathbb{R}^3 , $C(\xi)$ el complejo CW asociado y $\pi_1(G)$ el grupo fundamental de G . Entonces

1. $\pi_1(G) = \pi_1(C(\xi))$ el grupo fundamental del complejo CW como espacio topológico.
- 2.

$$\pi_1(G) = \begin{cases} \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} & \text{si } C(\xi) \text{ es un toro,} \\ \pi_1(\Delta'_G) & \text{el grupo fundamental libre de una gráfica } \Delta'_G, \\ & \text{si } C(\xi) \text{ tiene frontera.} \end{cases}$$

con \mathbb{Z} el grupo de los números enteros.

Demostración:

1. Es claro por la construcción del complejo $C(\xi)$.
2. Si $C(\xi)$ es un toro es conocido que $\pi_1(C(\xi)) = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$, ver [27].

Si $C(\xi)$ no es un toro, entonces $C(\xi)$ tiene frontera (Proposición 3.2.3). Demostraremos, por inducción sobre el número de hexágonos $h(G)$, que para un sistema hexagonal generalizado G con frontera, $\pi_1(G) \cong \pi_1(\Delta'_G)$ es un grupo libre.

Si $h(G) = 0$, entonces G es una gráfica y se sabe que $\pi_1(G)$ es un grupo libre (Teorema 1.5.2) de rango $rk(\pi_1(G)) = 1 + m(G) - n(G)$ con $m(G)$ número de aristas y $n(G)$ número de vértices de G .

Supongamos cierto para $h(G) \geq 1$. Ya que G tiene frontera, escogemos un hexágono

$$h = x_1 \xrightarrow{a_1} x_2 \xrightarrow{a_2} x_3 \xrightarrow{a_3} x_4 \xrightarrow{a_4} x_5 \xrightarrow{a_5} x_6 \xrightarrow{a_6} x_1,$$

tal que las aristas $a_1, a_2, \dots, a_{j-1}, a_j$ estén en la frontera de $C(\xi)$ para $1 \leq j < 6$ (sólo pertenecen a h) mientras que las aristas a_{j+1}, \dots, a_6 pertenecen a h y a otro hexágono.

Consideremos el sistema G' con vértices $G_0 - \{x_2, \dots, x_j\}$ y aristas $G_1 - \{a_1, \dots, a_j\}$. Entonces G' es un sistema hexagonal generalizado con $h(G') < h(G)$. Por hipótesis de inducción, $\pi_1(G') \cong \pi_1(\Delta'_{G'}) = \pi_1(\Delta'_G)$ es un grupo libre.

Escogemos x_0 un vértice en G' . Definiremos un homomorfismo de grupos

$$\rho : W(G, x_0) \longrightarrow W(G', x_0),$$

dado por, si $\omega = b_s^{\epsilon_s} \cdots b_2^{\epsilon_2} b_1^{\epsilon_1} \in W(G, x_0)$ con $\epsilon_i = \pm 1$ y $b_i \notin \{a_1, a_2, \dots, a_j\}$, entonces $\omega \in W(G', x_0)$ y $\rho(\omega) = \omega$ (consideraremos la orientación sobre las aristas de G' la inducida por (s, e)).

Si $b_i = a_{t(i)}$ para $1 \leq t(i) \leq j$, como la arista $a_{t(i)}$ está en la frontera de G , entonces

$$b_{i-t(i)+1} = a_1, b_{i-t(i)+2} = a_2, \dots, b_i = a_{t(i)}, b_{i+1} = a_{t(i)+1}, \dots, b_{i+j-t(i)} = a_j$$

y definimos

$$\rho(\omega) = b_s^{\epsilon_s} \cdots b_{i+j-t(i)+1}^{\epsilon_i+j-t(i)+1} a_{j+1}^{\epsilon_{j+1}} \cdots a_5^{\epsilon_5} a_6^{\epsilon_6} b_{i-t(i)}^{\epsilon_i-t(i)} \cdots b_2^{\epsilon_2} b_1^{\epsilon_1}.$$

Si $\omega \sim \omega'$ en $W(G, x_0)$, entonces son enviadas por ρ a trayectorias homotópicas en $W(G', x_0)$. Por lo tanto la función inducida

$$\bar{\rho} : \pi_1(G) \longrightarrow \pi_1(G')$$

dada por $\bar{\rho}([\omega]) = [\rho(\omega)]$ es un homomorfismo suprayectivo de grupos.

Si $\bar{\rho}([\omega]) = [\tau_{x_0}]$, entonces existe una sucesión de ciclos homotópicos en $W(G', x_0)$

$$\rho(\omega) \sim \omega_1 \sim \cdots \sim \omega_m = \tau_{x_0}.$$

Observemos que $\omega \sim \rho(\omega)$ en $W(G, x_0)$ y $\rho(\omega) \sim \omega_1 \sim \cdots \sim \omega_m = \tau_{x_0}$ ciclos homotópicos en $W(G, x_0)$. Por lo tanto $[\omega] = [\tau_{x_0}]$ y $\bar{\rho}$ es un isomorfismo, luego se tiene que $\pi_1(G) \cong \pi_1(G')$. \square

La demostración del Teorema anterior da una construcción de la gráfica Δ'_G tal que $\pi_1(G) \cong \pi_1(\Delta'_G)$. En efecto, Δ'_G es obtenida de G eliminando uno a uno los hexágonos en G (este proceso no es único). En la Figura 5.2 ilustramos el procedimiento para encontrar la gráfica Δ'_G .

La gráfica Δ'_G puede reducirse a una gráfica Δ_G que llamaremos *gráfica anudada*, considerando sólo aquellos vértices de Δ'_G de grado tres y una arista $x - y$ en Δ_G si existe una trayectoria $x = x_0 - x_1 - \cdots - x_s - x_{s+1} = y$ en Δ'_G con grado $d(x_i) = 2$ para $1 \leq i \leq s$. Si Δ'_G es un ciclo (todos sus vértices de grados dos), entonces Δ_G es un lazo (sin vértices).

Observemos que una inmersión $\xi' : \Delta'_G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ induce una inmersión $\xi : \Delta_G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ y se tiene que $\pi_1(G) \cong \pi_1(\Delta'_G) \cong \pi_1(\Delta_G)$. En la Figura 5.3, vemos un ejemplo donde la gráfica Δ'_G asociada a un sistema hexagonal G no es única y por lo tanto tampoco la gráfica Δ_G .

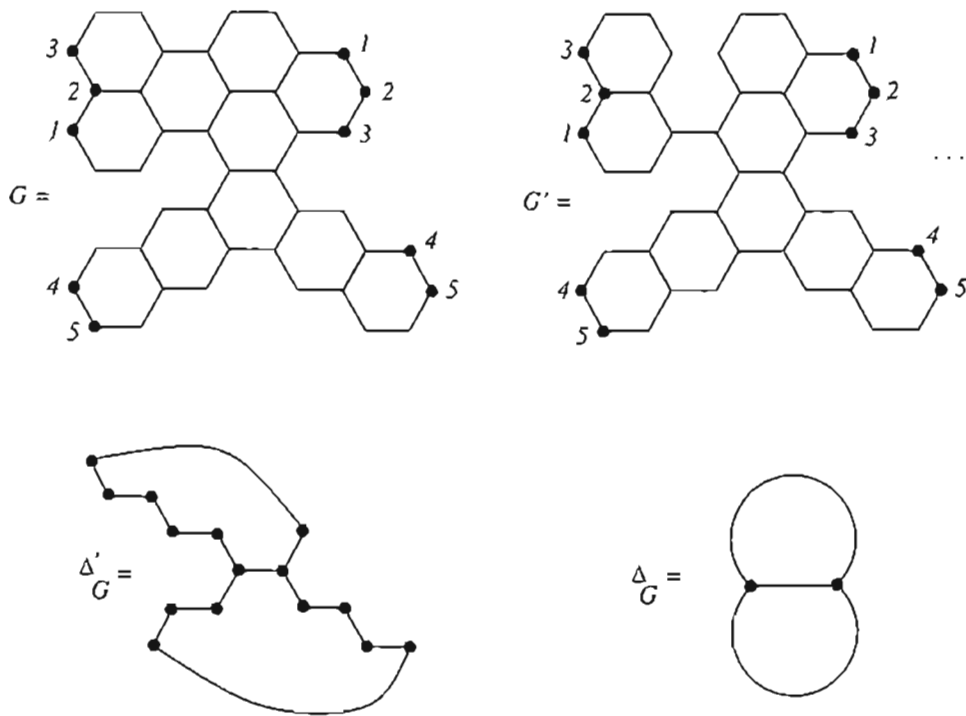


Figura 5.2: Construcción de la gráfica Δ_G .

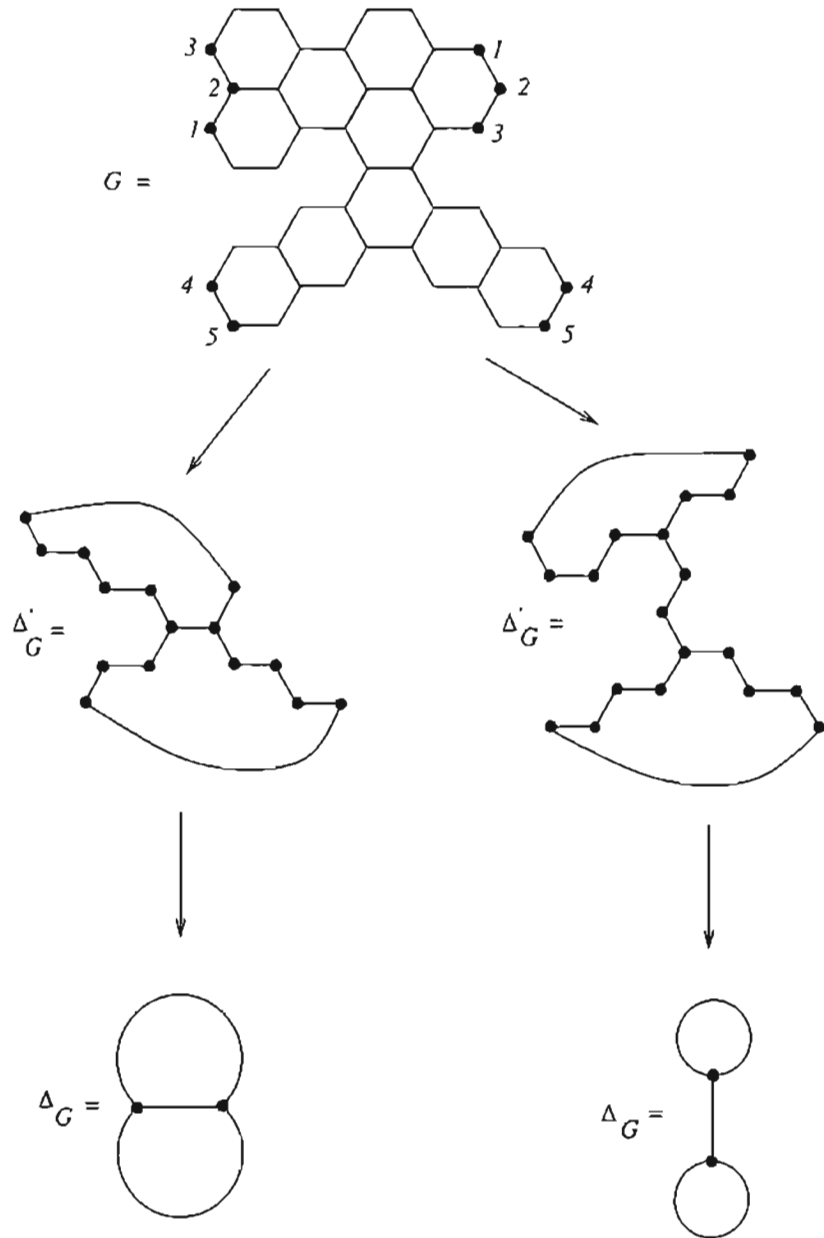


Figura 5.3:

5.2. Rango del grupo fundamental de un sistema hexagonal

Consideremos G un sistema hexagonal conexo con (s, e) una orientación en las aristas de G . Sean \mathcal{Z} un grupo abeliano arbitrario (aditivo), $C^0(G, \mathcal{Z})$ el conjunto de las funciones \mathcal{Z} -valuadas en G_0 y $z^1(G, \mathcal{Z})$ el conjunto de las funciones \mathcal{Z} -valuadas en G_1 tales que $\sum_{i=1}^6 (-1)^{\beta_i} f(a_i) = 0$ para cada hexágono:

$$h = x_1 \xrightarrow{a_1} x_2 \xrightarrow{a_2} x_3 \xrightarrow{a_3} x_4 \xrightarrow{a_4} x_5 \xrightarrow{a_5} x_6 \xrightarrow{a_6} x_1,$$

y donde:

$$\beta_i = \begin{cases} 0 & \text{si } s(a_i) = x_i \text{ y } e(a_i) = x_{i+1}. \\ 1 & \text{si no.} \end{cases} \quad (5.1)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$ ($x_7 = x_1$).

Proposición 5.2.1 *Sea G un sistema hexagonal conexo. Entonces se define una sucesión exacta de grupos abelianos:*

$$0 \longrightarrow \mathcal{Z} \xrightarrow{d^0} C^0(G, \mathcal{Z}) \xrightarrow{d^1} z^1(G, \mathcal{Z}) \xrightarrow{p} \text{Hom}(\pi_1(G), \mathcal{Z}) \longrightarrow 0$$

donde:

1. Definimos $d^0(\lambda) = f$ tal que $f(x) = \lambda$ para todo $x \in G_0$.
2. Si $f \in C^0(G, \mathcal{Z})$, definimos $d^1(f) \in z^1(G, \mathcal{Z})$ tal que si a es una arista en G , entonces $d^1(f)(a) = f(e(a)) - f(s(a))$.
3. Si $g \in z^1(G, \mathcal{Z})$, definimos $p(g)$ en $\text{Hom}(\pi_1(G), \mathcal{Z})$ de la siguiente manera:

$$p(g)([a_i^{\epsilon_i} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1}]) = \sum_{i=1}^t \epsilon_i g(a_i),$$

para

$$x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} x_2 \xrightarrow{a_3} \cdots \xrightarrow{a_{t-1}} x_{t-1} \xrightarrow{a_t} x_0,$$

un camino cerrado orientado del vértice x_0 ($\pi_1(G) = \pi_1(G, x_0)$, $x_0 \in G_0$ un vértice fijo) y $\epsilon_j = \pm 1$ para $j = 1, 2, \dots, t$.

Demostración:

Es claro que d^0 , d^1 y p son homomorfismos. Sea $f \in C^0(G, \mathcal{Z})$, tenemos que para cada hexágono h

$$\sum_{\substack{i=1 \\ a_i \in h}}^6 (-1)^{\beta_i} d^1(f)(a_i) = \sum_{i=1}^6 (-1)^{\beta_i} (f(e(a_i)) - f(s(a_i))) = 0,$$

luego $d^1(f) \in z^1(G, \mathcal{Z})$. Si $g \in z^1(G, \mathcal{Z})$, es claro que $W(G, x_0) \rightarrow \mathcal{Z}$, dada por $a_3^{\epsilon_3} \cdots a_1^{\epsilon_1} \mapsto \sum_{i=1}^s \epsilon_i g(a_i)$ está bien definida en las clases de homotopías y por lo tanto $p(g) \in \text{Hom}(\pi_1(G), \mathcal{Z})$.

Supongamos que $d^0(\lambda) = 0$. Entonces $\lambda = d^0(\lambda)(x) = 0$ para toda $x \in G_0$. Así vemos que d^0 es monomorfismo.

Veamos que $\text{Im}(d^0) = \text{Ker}(d^1)$. La composición $d^1 \circ d^0 = 0$, por lo tanto $\text{Im}(d^0) \subset \text{Ker}(d^1)$.

Sea $f \in \text{Ker}(d^1)$, entonces $f(e(a)) = f(s(a))$ para toda $a \in G_1$. Por la conexidad de G se tiene que f es una función constante y tenemos que $\text{Ker}(d^1) \subset \text{Im}(d^0)$.

Veamos que $\text{Im}(d^1) = \text{Ker}(p)$. Sea $g \in \text{Im}(d^1)$, entonces $g(a) = f(e(a)) - f(s(a))$ para toda $a \in G_1$ y alguna $f \in C^0(G, \mathcal{Z})$. Entonces para cada camino cerrado de x_0 :

$$x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} x_2 \xrightarrow{a_3} \cdots \xrightarrow{a_{l-1}} x_{l-1} \xrightarrow{a_l} x_0,$$

es claro que

$$p(g)([a_l^{\epsilon_l} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1}]) = \sum_{j=1}^l \epsilon_j (f(e(a_j)) - f(s(a_j))) = 0.$$

Luego $\text{Im}(d^1) \subset \text{Ker}(p)$.

Sea $g \in z^1(G, \mathcal{Z})$ tal que $p(g) = 0$. Consideremos γ_x un camino orientado del vértice x_0 al vértice x :

$$\gamma_x = x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} x_2 \xrightarrow{a_3} \cdots \xrightarrow{a_{l-1}} x_{l-1} \xrightarrow{a_l} x.$$

Definimos una función f en $C^0(G, \mathcal{Z})$ de la siguiente manera:

$$f(x) := \sum_{\substack{j=1 \\ a_j \in \gamma_x}}^l \epsilon_j g(a_j),$$

con $\epsilon_j = \pm 1$.

Si

$$\gamma'_x = x_0 \xrightarrow{b_1} y_1 \xrightarrow{b_2} y_2 \xrightarrow{b_3} \dots \xrightarrow{b_{z-1}} y_{z-1} \xrightarrow{b_z} x,$$

es otro camino de x_0 a x , entonces $[\gamma_x^{-1} \gamma'_x] \in \pi_1(G, x_0)$ y tenemos que

$$0 = p(g)([\gamma_x^{-1} \gamma'_x]) = \sum_{\substack{j=1 \\ b_j \in \gamma'_x}}^z \epsilon'_j g(b_j) + \sum_{\substack{j=1 \\ a_j \in \gamma_x^{-1}}}^l -\epsilon_j g(a_j).$$

Por lo tanto $f(x)$ está bien definida y no depende del camino γ_x que escogamos. Escribiremos $f(x) = f_{\gamma_x}(x) = f_{\gamma'_x}(x)$.

Veamos que $d^1(f) = g$. Sea $a \in G_1$ y

$$\begin{aligned} d^1(f)(a) &= f(e(a)) - f(s(a)) = f_{\gamma_{s(a)}}(e(a)) - f_{\gamma_{s(a)}}(s(a)) = \\ &= \sum_{\substack{j=1 \\ a_j \in \gamma_{s(a)}}}^l \epsilon_j g(a_j) + g(a) - \left(\sum_{\substack{j=1 \\ a_j \in \gamma_{s(a)}}}^l \epsilon_j g(a_j) \right) = \\ &= g(a). \end{aligned}$$

Luego $\text{Ker}(p) \subset \text{Im}(d^1)$.

Veamos que la función p es suprayectiva. Tenemos que $\pi_1(G) = \pi_1(G, x_0)$ para $x_0 \in G_0$ un vértice fijo.

Denotemos por γ_x la trayectoria de longitud mínima del vértice x_0 al vértice x para todo $x \in G_0$. Consideremos la aplicación:

$$f : \text{Hom}(\pi_1(G), \mathcal{Z}) \longrightarrow z^1(G, \mathcal{Z}),$$

dada por $f(\varphi)(a) = \varphi([\gamma_{e(a)}^{-1} a \gamma_{s(a)}])$ para todo $a \in G_1$. Sea h un hexágono en G

$$h = x_1 \xrightarrow{a_1} x_2 \xrightarrow{a_2} x_3 \xrightarrow{a_3} x_4 \xrightarrow{a_4} x_5 \xrightarrow{a_5} x_6 \xrightarrow{a_6} x_1,$$

y supongamos que $e(a_i) = s(a_{i+1})$ para toda $1 \leq i \leq 6$ ($a_7 = a_1$). Luego

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^6 f(\varphi)(a_i) &= \sum_{i=1}^6 \varphi([\gamma_{e(a_i)}^{-1} a_i \gamma_{s(a_i)}]) = \\ &= \varphi([\gamma_{e(a_6)}^{-1} a_6 a_5 a_4 a_3 a_2 a_1 \gamma_{s(a_1)}]) = \\ &= \varphi([\gamma_{s(a_1)}^{-1} \tau_{x_1} \gamma_{s(a_1)}]) = \varphi([\tau_{x_0}]) = 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto $f(\varphi) \in z^1(G, \mathcal{Z})$. Tenemos también que:

$$\begin{aligned} (p \circ f)(\varphi)([a_i^{\epsilon_i} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1}]) &= \sum_{j=1}^l \epsilon_j \varphi([\gamma_{e(a_j)}^{-1} a_j \gamma_{s(a_j)}]) = \\ &= \varphi([\gamma_{x_0}^{-1} a_i^{\epsilon_i} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1} \gamma_{x_0}]) = \\ &= \varphi([\tau_{x_0} a_i^{\epsilon_i} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1} \tau_{x_0}]) = \\ &= \varphi([a_i^{\epsilon_i} \cdots a_2^{\epsilon_2} a_1^{\epsilon_1}]). \end{aligned}$$

Luego f es inversa por la derecha de p , por lo tanto p es epimorfismo. \square

Teorema 5.2.2 *Sea G un sistema hexagonal conexo con frontera, $n(G)$ vértices, $m(G)$ aristas y $h(G)$ hexágonos. Entonces*

$$rk(\pi_1(G)) = m(G) - h(G) - n(G) + 1,$$

donde $rk(\pi_1(G))$ es el rango del grupo libre $\pi_1(G)$.

Demostración:

Es claro que $rk(\pi_1(G)) = \dim_{\mathbb{Q}} \text{Hom}(\pi_1(G), \mathbb{Q})$ donde \mathbb{Q} representa el grupo abeliano aditivo de los números racionales. Aplicando la Proposición 5.2.1 con $\mathcal{Z} = \mathbb{Q}$ obtenemos:

$$\dim_{\mathbb{Q}} \text{Hom}(\pi_1(G), \mathbb{Q}) = \dim_{\mathbb{Q}} z^1(G, \mathbb{Q}) - \dim_{\mathbb{Q}} C^0(G, \mathbb{Q}) + 1.$$

Si $G_0 = \{x_1, x_2, \dots, x_{n(G)}\}$, definamos las funciones:

$$f_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j. \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

para $i, j = 1, 2, \dots, n(G)$. Luego $\{f_i : i = 1, 2, \dots, n(G)\}$ es una base para $C^0(G, \mathbb{Q})$.

Como en la demostración del Teorema 5.1.1, consideraremos sistemas hexagonales generalizados G y probaremos por inducción sobre el número de hexágonos $h(G)$ que $\dim_{\mathbb{Q}} z^1(G, \mathbb{Q}) = m(G) - h(G)$. Fijemos una orientación (s, e) sobre las aristas de G .

Para $h(G) = 0$, tenemos que G es una gráfica con

$$z^1(G, \mathbb{Z}) = \{f : G_1 \rightarrow \mathbb{Q}\} = \mathbb{Q}^{G_1}.$$

Por lo tanto $\dim_{\mathbb{Q}} z^1(G, \mathbb{Q}) = m(G)$.

Supongamos cierto para $h(G) \geq 1$. Escogemos un hexágono h con aristas $a_i = \{x_i, x_{i+1}\}$ para $i = 1, 2, \dots, j$ en la frontera de G . Definimos el sistema hexagonal generalizado G' con vértices $G'_0 = G_0 - \{x_2, \dots, x_j\}$ y aristas $G'_1 = G_1 - \{a_1, \dots, a_j\}$. Por hipótesis de inducción obtenemos que

$$\dim_{\mathbb{Q}} z^1(G', \mathbb{Q}) = m(G') - h(G') = m(G) - h(G) - j + 1.$$

Definiremos una sucesión exacta:

$$0 \longrightarrow \{v \in \mathbb{Q}^j : \sum_{i=1}^j (-1)^{\beta_i} v(i) = \vec{0}\} \xrightarrow{\sigma} z^1(G, \mathbb{Q}) \xrightarrow{\rho} z^1(G', \mathbb{Q}) \longrightarrow 0 \quad (5.2)$$

con los β_i dado en (5.1) y

1. $\sigma(v) : G_1 \rightarrow \mathbb{Q}$ dada por

$$a \longmapsto \begin{cases} v(i) & \text{si } a = a_i \ (1 \leq i \leq j). \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

2. $\rho(f) : G'_1 \rightarrow \mathbb{Q}$, la restricción de $f : G_1 \rightarrow \mathbb{Q}$.

Claramente, σ y ρ son homomorfismos bien definidos con σ monomorfismo y la composición $\rho \circ \sigma = 0$.

Si $f \in z^1(G, \mathbb{Q})$ con $\rho(f) = 0$, entonces

$$\sum_{i=1}^j (-1)^{\beta_i} f(a_i) = \sum_{i=1}^6 (-1)^{\beta_i} f(a_i) = 0$$

y $\sigma(f(a_i)_{i=1, \dots, j}) = f$. Luego $\text{Ker}(\rho) = \text{Im}(\sigma)$.

Sea $f' \in z^1(G', \mathbb{Q})$ y consideremos $f : G_1 \rightarrow \mathbb{Q}$ con $\rho(f) = f'$ extendida por

$$(-1)^{\beta_i} f(a_i) = - \sum_{i=j+1}^6 (-1)^{\beta_i} f'(a_i),$$

y $f(a_i) = 0$ para $1 < i \leq j$. Por lo tanto ρ es epimorfismo y la sucesión (5.2) es exacta y obtenemos que

$$\dim_{\mathbb{Q}} z^1(G, \mathbb{Q}) = \dim_{\mathbb{Q}} z^1(G', \mathbb{Q}) + j - 1.$$

□

Corolario 5.2.3 *Sea G un sistema hexagonal conexo con frontera, $\pi_1(G)$ su grupo fundamental, $n(G)$ vértices, $m(G)$ aristas y $h(G)$ hexágonos. Las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

1. $\pi_1(G) = 0$.
2. $\text{Hom}(\pi_1(G), \mathcal{Z}) = 0$ para algún grupo abeliano $\mathcal{Z} \neq 0$.
3. d^1 es una aplicación sobre para algún $\mathcal{Z} \neq 0$.
4. $m(G) + 1 = n(G) + h(G)$.

Demostración:

Es claro usando la Proposición 5.2.1 y Teorema 5.2.2. □

Un sistema hexagonal generalizado en particular un sistema hexagonal G que cumple una de las condiciones del Corolario anterior se dice *simplemente conexo*.

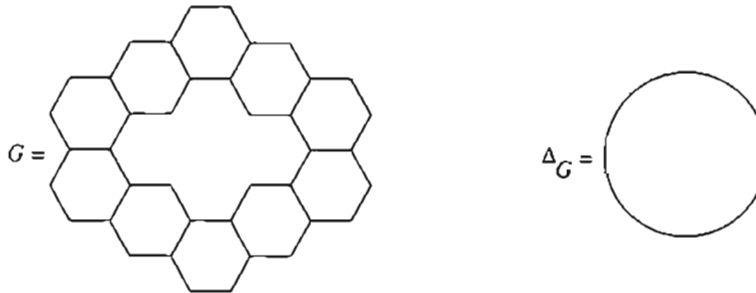


Figura 5.4:

Proposición 5.2.4 *Si G es un sistema hexagonal generalizado simplemente conexo con frontera, entonces G es aplanable.*

Demostración:

Usamos inducción sobre el número de hexágonos $h(G)$ de G . Si $h(G) = 0$, entonces G es una gráfica árbol ($\pi_1(G) = 0$), luego G es aplanable.

Sea G un sistema hexagonal generalizado con frontera, $\pi_1(G) = 0$ y $h(G) \geq 1$. Consideraremos G' como en la demostración de Teorema 5.1.1, entonces $0 = \pi_1(G) \cong \pi_1(G')$, G' tiene frontera y $h(G') = h(G) - 1$, luego por hipótesis de inducción G' es aplanable y por lo tanto G es aplanable. \square

Corolario 5.2.5 *Si G es un sistema hexagonal simplemente conexo con frontera, entonces G es aplanable.* \square

El recíproco de la Proposición anterior es falso ya si G es el sistema hexagonal dado en la Figura 5.4, se tiene que $\Delta_G = S^1$ la esfera unitaria y $\pi_1(G) \cong \pi_1(\Delta_G) = \mathbb{Z}$.

Consideremos G un sistema hexagonal generalizado con gráfica anudada Δ_G asociada (sección anterior).

Proposición 5.2.6 *Sea G un sistema hexagonal generalizado sin vértices de grado uno, conexo y con frontera. Supongamos que $rk(\pi_1(G)) > 0$, entonces la gráfica anudada Δ_G tiene $2(rk(\pi_1(G)) - 1)$ vértices todos de grados tres.*

Demostración:

Consideremos $n_2(G)$ el número de vértices de grado dos de G y $n_3(G)$ el número de vértices de grado tres, entonces

$$n(G) = n_2(G) + n_3(G), \quad (5.3)$$

con $n(G)$ el total de vértices de G . Por el Teorema 1.1.1 se tiene

$$m(G) = \frac{3}{2}n_3(G) + n_2(G), \quad (5.4)$$

donde $m(G)$ es el total de aristas de G .

Reemplazando (5.3) y (5.4) en el Teorema 5.2.2 obtenemos que

$$rk(\pi_1(G)) - 1 = m(G) - n(G) - h(G) = \frac{1}{2}n_3(G) - h(G), \quad (5.5)$$

con $h(G)$ el total de hexágonos de G . Si $h(G) = 0$, entonces $G = \Delta'_G = \Delta_G$ y por lo tanto Δ_G tiene $n_3(G) = 2(rk(\pi_1(G)) - 1)$ vértices, todos de grado tres. Supongamos que $h(G) \geq 1$ y consideremos G' como en la demostración de Teorema 5.1.1. Por hipótesis de inducción $\Delta_G = \Delta_{G'}$ tiene $2(rk(\pi_1(G')) - 1) = 2(rk(\pi_1(G)) - 1)$ vértices, todos de grados tres. \square

Para el conteo de los grados de la gráfica Δ_G es claro que los lazos se cuentan dos veces. Para la gráfica anudada Δ_G tenemos

$$m(\Delta_G) = \frac{3}{2}n(\Delta_G) = 3(rk(\pi_1(G)) - 1).$$

5.3. Cubierta universal de un sistema hexagonal

Consideremos G un sistema hexagonal conexo con $\pi_1(G)$ su grupo fundamental. Construiremos un sistema hexagonal \tilde{G} (el cual es un sistema infinito si $rk(\pi_1(G)) > 0$) estabilizada por la acción del grupo fundamental $\pi_1(G)$ y tal que la cubierta de Galois:

$$\pi : \tilde{G} \longrightarrow \tilde{G}/\pi_1(G) \cong G$$

es la cubierta universal de G (sección 1.4.3). Esta construcción sigue argumentos similares para álgebras finita dimensional dada como cociente de carcaj de álgebras, ver [34].

Fijemos un vértice $x_0 \in G_0$ y (s, e) una orientación fija sobre las aristas de G , denotaremos por $\Pi = \pi_1(G, x_0)$ el grupo fundamental de G con base $x_0 \in G_0$ y para cada vértice $x \in G_0$ fijamos un camino γ_x de x_0 a x de acuerdo a la orientación (s, e) . Definiremos el sistema hexagonal \tilde{G} y la aplicación $\pi : \tilde{G} \rightarrow G$ como sigue:

1. Vértices de \tilde{G} : $\tilde{G}_0 = G_0 \times \Pi$;
2. Aristas de \tilde{G} : Para la arista $x \xrightarrow{a} y$ en G y $[\omega] \in \Pi$, definimos la arista $(x, [\omega]) \xrightarrow{a} (y, [\gamma_y^{-1} a \gamma_x \omega])$ en \tilde{G} .
3. $\pi : \tilde{G} \rightarrow G$ es definida como la proyección natural.
4. Hexágono en \tilde{G} : Cualquier ciclo de longitud seis con aristas

$$\{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6\}$$

tal que:

$$\{\pi(a_1), \pi(a_2), \pi(a_3), \pi(a_4), \pi(a_5), \pi(a_6)\}$$

es un hexágono en G .

El grupo Π actúa (de forma natural) libremente sobre los vértices de \tilde{G} , en efecto, si

$$(x, [\omega]) = [\omega'] (x, [\omega]) = (x, [\omega' \omega]),$$

para algún $[\omega'] \in \Pi$, entonces $\omega \sim \omega' \omega$ y por lo tanto $\omega' \sim \tau_{x_0}$. Más aún $\tilde{G}/\Pi = G$ como sistema hexagonal.

Dada cualquier otra cubierta de Galois $\pi' : G' \rightarrow G$ definida por la acción de un grupo Γ , definiremos una aplicación $\bar{\pi} : \tilde{G} \rightarrow G'$ de sistemas hexagonales. Consideremos (s', e') una orientación en las aristas de G' dada por el Lema 1.4.1. Fijemos $x'_0 \in G'_0$ con $\pi'(x'_0) = x_0$ y definimos $\bar{\pi}((x_0, [\tau_{x_0}])) = x'_0$.

Para cualquier $x \in G_0$ y $[\omega] \in \Pi$, escogemos cualquier trayectoria γ_x de x_0 a x en G . La trayectoria $\gamma_x \omega$ va de x_0 a x y puede ser levantada a una trayectoria γ'_x en G' (propiedad 1. sección 1.4.1), esto es, $\pi'(\gamma'_x) = \gamma_x \omega$. Si x' es el vértice final de γ'_x , definimos $\bar{\pi}((x, [\omega])) = x'$. Esto determina la aplicación $\bar{\pi} : \tilde{G} \rightarrow G'$. Propiedades adicionales de esta aplicación son:

1. $\pi = \pi' \bar{\pi}$;
2. La aplicación $\bar{\pi}$ es una cubierta de Galois definida por la acción de un grupo H el cual es un subgrupo normal de $\pi_1(G)$ tal que $\pi_1(G)/H \cong \Gamma$.

En la Figura 5.5, muestra ejemplos de cubierta universal de sistemas hexagonales.

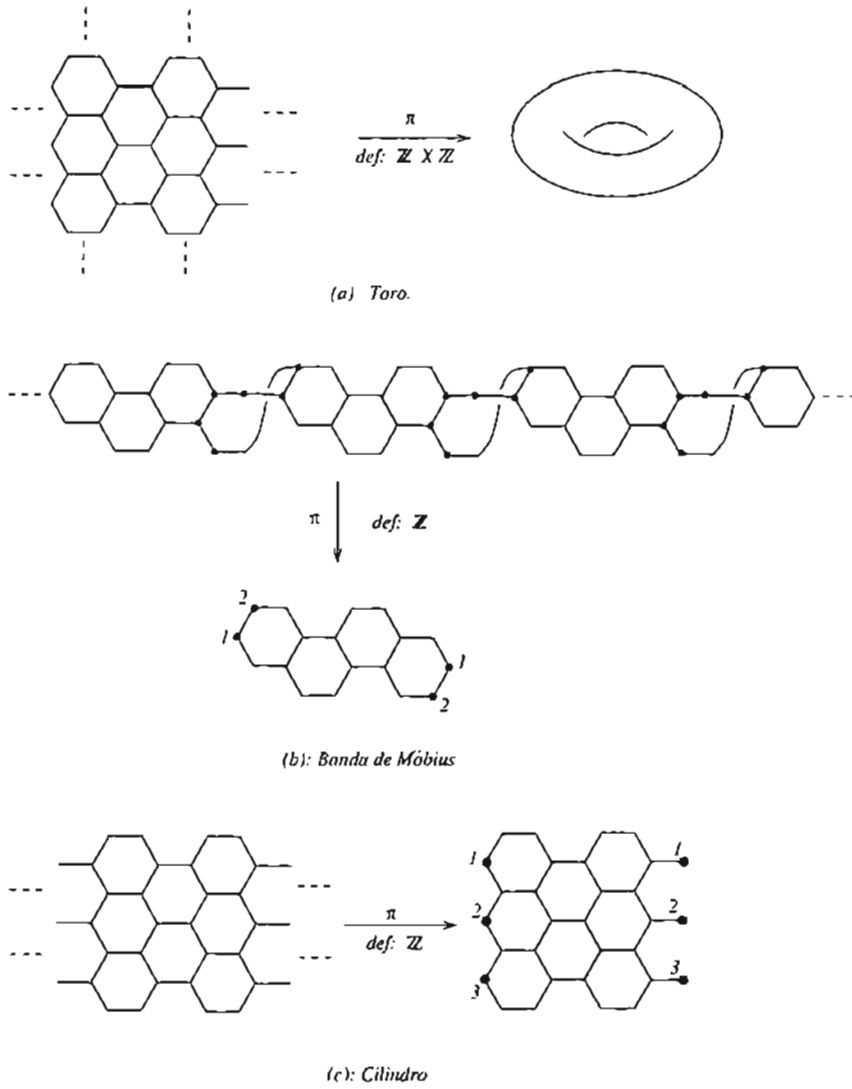


Figura 5.5: Cubierta universal de sistemas hexagonales. (Identificamos los vértices con la misma etiqueta)

5.4. Dominio fundamental de un sistema hexagonal

Sea $\pi : \tilde{G} \rightarrow G = \tilde{G}/\pi_1(G)$ la cubierta universal de un sistema hexagonal finito, conexo y con frontera G . Fijemos (s, e) una orientación en las aristas de G . Tomemos cualquier subgráfica inducida G^f de \tilde{G} cumpliendo:

(F1) G^f es conexa;

(F2) $|\pi^{-1}(x) \cap G^f| \leq 1$, para cualquier vértice $x \in G_0$;

(F3) G^f es maximal con las propiedades (F1) y (F2).

Consideremos G^f como el subsistema hexagonal generalizado inducido de \tilde{G} . Entonces decimos que G^f es un *dominio fundamental* de G .

Proposición 5.4.1 *Sea G^f un dominio fundamental de G . Entonces lo siguiente se cumple:*

1. $|\pi^{-1}(x) \cap G^f| = 1$ para cualquier vértices $x \in G_0$;
2. Sean a_1, a_2, \dots, a_m aristas de G que no están en $\pi(G^f)$. Elegimos aristas a_1, a_2, \dots, a_s con $s \leq m$ tal que para cualquier hexágono h de G , tenemos

$$|\{1 \leq i \leq s : a_i \text{ arista de } h\}| = \begin{cases} 0 & \text{si } h \subset \pi(G^f), \\ |\{1 \leq j \leq m : a_j \text{ arista de } h\}| - 1 & \text{si no.} \end{cases}$$

Entonces existe una manera de seleccionar caminos γ_x de un vértice fijo x_0 a $x \in G_0$, de tal forma que $\gamma_{x_0} = \tau_{x_0}$ y $\{[\gamma_{e(a_i)}^{-1} a_i \gamma_{s(a_i)}] : 1 \leq i \leq s\}$ es un sistema libre de generadores de $\pi_1(G) = \pi_1(G, x_0)$.

3. G^f es simplemente conexo.

Demostración:

1. Se sigue de F1 y F3.

2. Sea $x_0 \in G_0$ y $x'_0 \in G_0^f$ tal que $\pi(x'_0) = x_0$. Para cada $x' \in G_0^f$, elegimos un camino γ'_x de x'_0 a x' en G^f y escribimos $\gamma_x = \pi(\gamma'_x)$ de x_0 a $x = \pi(x')$.

Observemos que $\{[\gamma_{e(a)}^{-1} a \gamma_{s(a)}] : a \in G_1\}$ es un sistema de generadores de $\pi_1(G, x_0) = \pi_1(G)$. Más aún, si $a = \pi(a')$ para algún $a' \in G^f$, entonces el

camino cerrado dado por $\gamma_{e(a')}^{-1} a' \gamma_{s(a')}$ en G^f es homotópico nulo (trivial) en \tilde{G} . Por lo tanto $\gamma_{e(a)}^{-1} a \gamma_{s(a)}$ es homotópico nulo o es homotópico al producto de $\gamma_{e(b)}^{-1} b \gamma_{s(b)}$ con $b \notin \pi(G_1^f)$. Concluimos que $\{ [\gamma_{e(b)}^{-1} b \gamma_{s(b)}] : b \in G_1 - \pi(G_1^f) \}$ es un sistema de generadores de $\pi_1(G, x_0)$.

Usando que los hexágonos en G son homotópicos nulos, obtenemos que $\{ [\gamma_{e(a_i)}^{-1} a_i \gamma_{s(a_i)}] : 1 \leq i \leq s \}$ es un sistema de generadores de $\pi_1(G)$. Cuántos a_i ($1 \leq i \leq s$) tenemos?

$$\begin{aligned}
 s &= |\{ a \in G_1 : a \notin \pi(G_1^f) \}| - |\{ h \in G : h \notin \pi(G^f) \}| \\
 &= m(G) - m(G^f) - h(G) + h(G^f) \\
 &= (m(G) - h(G) - n(G) + 1) - (m(G^f) - h(G^f) - n(G^f) + 1) \\
 &= rk(\pi_1(G)) - rk(\pi_1(G^f)) \leq rk(\pi_1(G^f)).
 \end{aligned}$$

Por lo tanto obtenemos que $s = rk(\pi_1(G))$ y $\{ [\gamma_{e(a_i)}^{-1} a_i \gamma_{s(a_i)}] : 1 \leq i \leq s \}$ es un sistema de generadores de $\pi_1(G)$.

3. En 2. se demuestra que $\pi_1(G^f) = 0$. □

En la Figura 5.6, construimos un dominio fundamental G^f . Las aristas $1 \xrightarrow{a} x$ y $5 \xrightarrow{b} y$ no pertenece a $\pi(G_1^f)$ y conduce a generadores para $\pi_1(G)$ en la forma descrita en la Proposición 5.4.1. Más aún, tenemos marcado caminos γ_x de x a 1 y γ_y de y a 5 en $\pi(G^f)$ el cual son caminos en Δ'_G despues de eliminar los hexágonos de G (este proceso no es único). Por lo tanto $\pi(G^f) \cap \Delta'_G$ es un árbol maximal en Δ'_G .

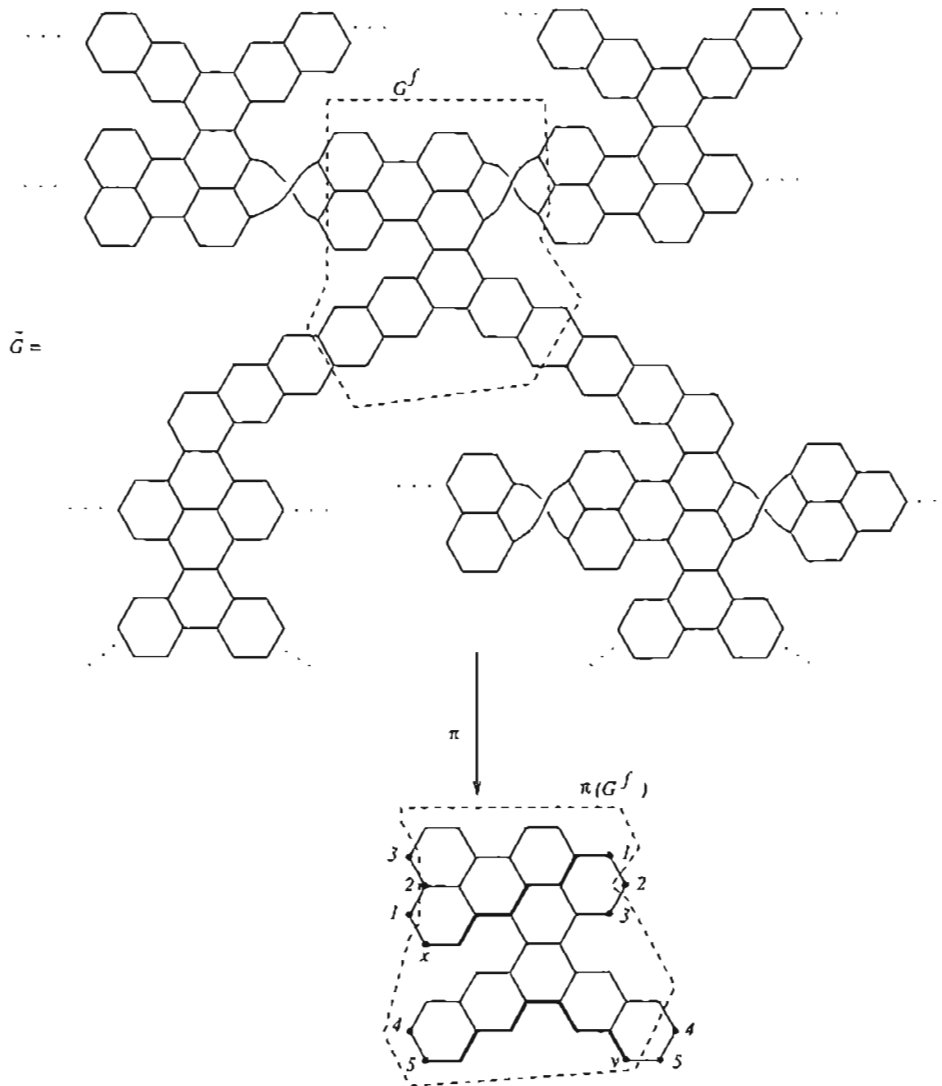


Figura 5.6: Dominio fundamental.

5.5. Estructura de sistemas hexagonales

Sea $G = (G_0, G_1, \mathcal{H}(G))$ un sistema hexagonal conexo finito y con frontera. Sea G^f un dominio fundamental de G y supongamos que $rk(\pi_1(G)) > 0$. Seleccionamos caminos γ_x de x_0 a x , para vértice $x \in G_0$ y aristas a_1, a_2, \dots, a_s no en $\pi(G^f)$ tal que $\{[\gamma_{e(a_i)}^{-1} a_i \gamma_{s(a_i)}] : 1 \leq i \leq s\}$ es un sistema de generadores de $\pi_1(G, x_0) = \pi_1(G)$ (Proposición 5.4.1), donde (s, e) es una orientación fija de G_1 . Es claro que podemos seleccionar a_i ($1 \leq i \leq s$) no en la frontera de G (si por el contrario, si $a_i \in h$ con $h \in G$ por definición de s en la Proposición 5.4.1 2., todas las aristas de h están en la frontera y $h(G) = 1$, contradiciendo el hecho que $rk(\pi_1(G)) > 0$). Tenemos el siguiente resultado.

Proposición 5.5.1 *Sea G un sistema hexagonal como antes y $\pi : \tilde{G} \rightarrow G$ la cubierta universal de G definida por $\pi_1(G)$. Para cada $1 \leq i \leq s$, existe una cadena de hexágonos $h_0^i, h_1^i, \dots, h_{m_i}^i$ en G , cumpliendo:*

1. h_j^i y h_{j+1}^i tiene una arista en común a_j^i para $0 \leq j \leq m_i$ y $h_{m_i+1}^i = h_0^i$;
2. $a_0^i = a_i$;
3. La subgráfica inducida de G definida por $h_0^i, h_1^i, \dots, h_{m_i}^i$ induce a un sistema hexagonal G_i el cual es un n_i -configuración cónica (sección 3.1), para algún $n_i \in \mathbb{Z}$.

Demostración:

Sea $a = a_i = \{x, y\} \in G_1$ una de las aristas elegidas ($1 \leq i \leq s$). Sean $x', y' \in G_0^f$ tal que $\pi(x') = x$ y $\pi(y') = y$. Sea $a' = \{x', y''\}$ y $a'' = \{x'', y'\}$ aristas en \tilde{G} con $\pi(a') = a = \pi(a'')$. Ya que $a \notin \pi(G^f)$, entonces $x'', y'' \notin G^f$.

Ya que G^f es conexa, consideremos un camino hamiltoniano

$$x' = z_1 \xrightarrow{b_1} z_2 \xrightarrow{b_2} \dots \xrightarrow{b_k} z_{k+1} = y' \quad (5.6)$$

en G^f . Encontramos una sucesión de hexágonos h'_1, h'_2, \dots, h'_m en \tilde{G} definido por:

1. h'_1 contiene b_1, \dots, b_{p_1} como aristas, pero no b_{p_1+1} , con b_{p_1} maximal con esta propiedad.
2. Si h'_1, \dots, h'_j son definido y contiene b_1, \dots, b_{p_j} como arista, pero no b_{p_j+1} , elegimos h'_{j+1} conteniendo a $b_{p_j+1}, \dots, b_{p_{j+1}}$ como arista, pero no $b_{p_{j+1}+1}$ con p_{j+1} maximal con esta propiedad.

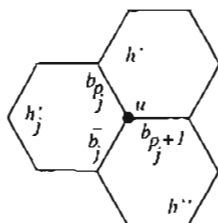


Figura 5.7:

Supongamos definido h'_1, \dots, h'_r una sucesión maximal. Entonces b_k (5.6) es una arista de h'_r . Veamos que h'_j y h'_{j+1} tiene una arista en común b'_j para $1 \leq j \leq r-1$, en efecto, b_{p_j} y $b_{p_{j+1}}$ son dos de las tres aristas en \tilde{G} con vértice común u , la tercera arista \bar{b}_j pertenece a h'_j pero no al camino de x' a y' (5.6), ver Figura 5.7.

Existen a lo más dos hexágonos (y al menos uno) h' y h'' teniendo $b_{p_{j+1}}$ como una arista. Elejimos para h'_{j+1} más aristas b_i del camino de x' a y' . Si $h'_{j+1} = h'$, entonces $b'_j := b_{p_j}$; si $h'_{j+1} = h''$, entonces $b'_j := \bar{b}_j$.

Consideremos la sucesión $h_1 = \pi(h'_1), \dots, h_r = \pi(h'_r)$ de diferentes hexágonos en G tal que h_j y h_{j+1} tiene una arista en común $a_j = \pi(b'_j)$, con $1 \leq j \leq r-1$. Para obtener nuestro enunciado necesitamos cerrar la cadena para formar una configuración cónica. Distinguimos varios casos:

1. La arista $a' = \{x', y''\}$ pertenece a h'_1 y $a'' = \{x'', y'\}$ pertenece a h'_r . En G obtenemos la configuración, ver Figura 5.8 (1).
2. La arista $a' = \{x', y''\}$ pertenece a h'_1 , pero $a'' = \{x'', y'\}$ no pertenece a h'_r . En G obtenemos la configuración, ver Figura 5.8 (2). El hexágono h_{r+1} es el segundo (h_1 es el primero) en tener a como una arista.
3. La arista $a' = \{x', y''\}$ no pertenece a h'_1 , pero $a'' = \{x'', y'\}$ pertenece a h'_r . En G obtenemos la configuración, ver Figura 5.8 (3). Donde h_0 es el segundo hexágono (h_r es el primero) en tener a como arista.
4. La arista $a' = \{x', y''\}$ no pertenece a h'_1 y $a'' = \{x'', y'\}$ no pertenece a h'_r . En G obtenemos la configuración, ver Figura 5.8 (4). En este caso h_0 y h_{r+1} son los hexágonos en G teniendo en común la arista $a = \{x, y\}$.

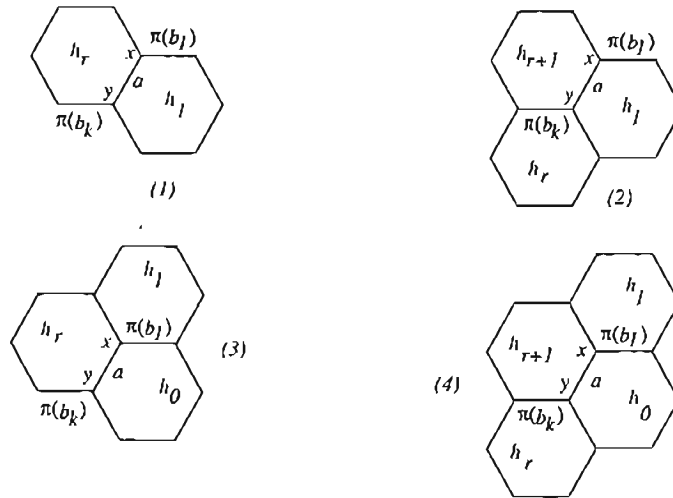


Figura 5.8:

En todos los casos obtenemos la configuración cónica deseada. \square

Un camino cerrado $x_0 \xrightarrow{\alpha_1} x_1 \xrightarrow{\alpha_2} \dots \xrightarrow{\alpha_k} x_k \xrightarrow{\alpha_{k+1}} x_0$ en una gráfica Δ se dice un *ciclo simple* si no existe aristas entre x_i y x_j con $|i - j| \geq 2$ y $0 \leq i, j \leq k + 1$ ($x_{k+1} = x_0$).

Sea G un sistema hexagonal, consideremos la gráfica anudada Δ_G (sección 5.1) y a_1, a_2, \dots, a_s aristas de G la cual induce un sistema de generadores de $\pi_1(G)$ como en la Proposición 5.4.1. Para cada $1 \leq i \leq s$, sea $h_0^i, h_1^i, \dots, h_{m_i}^i$ una cadena de hexágonos en G cumpliendo las condiciones de la Proposición 5.5.1. En particular, la subgráfica inducida de G definida por $h_0^i, h_1^i, \dots, h_{m_i}^i$ induce a un sistema hexagonal G_i el cual es un n_i -configuración cónica (para algún $n_i \in \mathbb{Z}$). Existen ciclos simples \tilde{c}^i en Δ'_G y c^i en Δ_G , donde c^i es obtenido de \tilde{c}^i conservando sólo aquellos vértices de \tilde{c}^i de grado tres, y \tilde{c}^i es obtenido de G_i eliminando los hexágonos de G_i .

Definimos una *valuación* $v_G : \mathcal{C}(\Delta_G) \rightarrow \mathbb{Z}$ del conjunto de los ciclos simples $\mathcal{C}(\Delta_G)$ de Δ_G como sigue: sea (s, e) una orientación de G_1 y γ_x caminos de x_0 a x en G para un vértice fijo $x_0 \in G$. Entonces $g_i = [\gamma_{x_i}^{-1} \tilde{c}^i \gamma_{x_i}]$ para $(1 \leq i \leq s)$ es un conjunto de generadores de $\pi_1(G, x_0) = \pi_1(G)$. Ya que $\pi_1(G)$ es un grupo libre podemos definir un homomorfismo $v'_G : \pi_1(G) \rightarrow \mathbb{Z}$ dada por $g_i \mapsto n_i$.

Lema 5.5.2 Existe una función $v_G : \mathcal{C}(\Delta_G) \rightarrow \mathbb{Z}$ cumpliendo:

1. Para cualquier ciclo $c \in \mathcal{C}(\Delta_G)$, con

$$c = y_0 \xrightarrow{c_1} y_1 \xrightarrow{c_2} \cdots \xrightarrow{c_r} y_r = y_0,$$

tenemos que $v_G(c) = v'_G([\gamma_{y_0}^{-1} c_r \cdots c_1 \gamma_{y_0}])$;

2. $v_G(c^i) = n_i$, para algún $1 \leq i \leq s$.

Demostración:

Para 1. probaremos que

$$v'_G([\gamma_{y_0}^{-1} c_r \cdots c_1 \gamma_{y_0}]) = v'_G([\gamma_{y_j}^{-1} c_j \cdots c_1 c_r \cdots c_{j+1} \gamma_{y_j}])$$

para cualquier $1 \leq j \leq r$. Ya que $v'_G : \pi_1(G) \rightarrow \mathbb{Z}$ es un homomorfismo de grupo tenemos

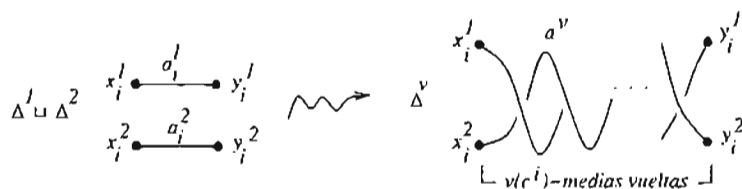
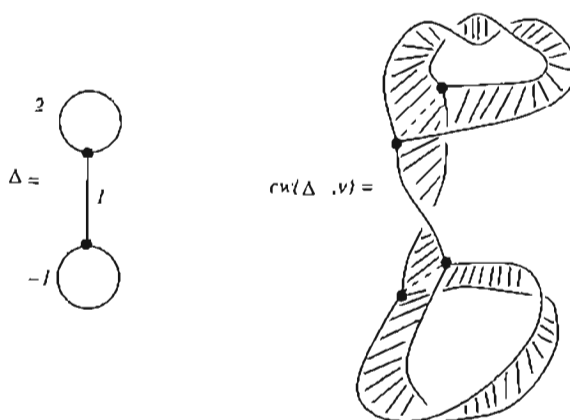
$$\begin{aligned} v'_G([\gamma_{y_0}^{-1} c_r \cdots c_1 \gamma_{y_0}]) &= v'_G([\gamma_{y_0}^{-1} c_r \cdots c_{j+1} \gamma_{y_j}]) + v'_G([\gamma_{y_j}^{-1} c_j \cdots c_1 \gamma_{y_0}]) = \\ &= v'_G([\gamma_{y_j}^{-1} c_j \cdots c_1 \gamma_{y_0}]) + v'_G([\gamma_{y_0}^{-1} c_r \cdots c_{j+1} \gamma_{y_j}]) = \\ &= v'_G([\gamma_{y_j}^{-1} c_j \cdots c_1 c_r \cdots c_{j+1} \gamma_{y_j}]) \end{aligned}$$

Para 2. es claro por la definición de v'_G . □

Dada una gráfica anudada Δ con todos sus vértices de grado tres y una valuación $v : \mathcal{C}(\Delta) \rightarrow \mathbb{Z}$ del conjunto de los ciclos simples en Δ , definiremos un complejo CW que denotaremos por $cw(\Delta, v)$.

Primero definimos la *gráfica entrelazada* Δ^v de la siguiente forma: fijamos una orientación (s, e) de G y consideremos dos copias Δ^1 y Δ^2 de la gráfica Δ ; fijamos c^1, \dots, c^s ciclos simples en Δ con $s = \tau k(\pi_1(\Delta))$ y $a_i = \{x_i, y_i\}$ una arista de c^i (para $1 \leq i \leq s$). En Δ^v sustituimos las dos copias a_i^1 y a_i^2 de a_i en $\Delta^1 \sqcup \Delta^2$ por a^v como se muestra en la Figura 5.9, si $s(a_i) = x_i$ y $e(a_i) = y_i$; en caso contrario las medias vueltas de la arista a^v en Δ^v será en sentido contrario.

El CW -complejo $cw(\Delta, v)$ tiene $\Delta_0^1 \sqcup \Delta_0^2$ como 0-esqueleto, las aristas de Δ^v como 1-esqueleto y el 2-esqueleto es obtenido de adjuntar el cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ de la siguiente forma:

Figura 5.9: Arista a^v de la gráfica Δ^v .Figura 5.10: CW -complejo de una gráfica anudada.

1. Si $a \neq a_i$ en Δ , identificamos $[0, 1] \times \{0\}$ con a^1 y $[0, 1] \times \{1\}$ con a^2 ;
2. Si $a = a_i$ en Δ identificamos $[0, 1] \times \{0\}$ (resp. $[0, 1] \times \{1\}$) con la arista de a^v empezando en x_i^1 (resp. x_i^2);
3. Si $x \xrightarrow{a} y \xrightarrow{b} z$ en Δ identificamos $\{1\} \times [0, 1]$ con la celda correspondiente a a y $\{0\} \times [0, 1]$ con la celda correspondiente a b .

Como ejemplo ver la Figura 5.10.

Dos sistemas hexagonales G^1 y G^2 con inmersiones $\xi : G^1 \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ y $\eta : G^2 \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ se dicen que son *equivalentes* si existe un homomorfismo que preserva orientación $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $f(\text{Im}(\xi)) = \text{Im}(\eta)$ (sección 1.3). Claramente, en este caso, los CW complejos $cw(G^1)$ y $cw(G^2)$ son equivalentes. Los argumentos anteriores fácilmente implica el siguiente resultado.

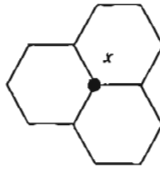


Figura 5.11: Vértice interno.

Teorema 5.5.3 Dado un sistema hexagonal G conexo con frontera, la selección de una gráfica anudada $\Delta_G \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ con valuación $v_G : \mathcal{C}(\Delta_G) \rightarrow \mathbb{Z}$, determinan las clases de homotopías del complejo CW de G . Má aún, para una gráfica Δ regular de grado tres, con valuación $v : \mathcal{C}(\Delta) \rightarrow \mathbb{Z}$, existe un sistema hexagonal G con $(\Delta_G, v_G) = (\Delta, v)$. \square

5.6. Invariantes asociados a un sistema hexagonal en \mathbb{R}^3

5.6.1. Número de vértices y número de aristas

Sea G un sistema hexagonal conexo. Denotaremos por $n(G)$ número de vértices, $m(G)$ número de aristas, $h(G)$ número de hexágonos, $rk(\pi_1(G))$ rango del grupo fundamental de G .

Diremos que un vértice $x \in G_0$ es un *vértice interno* si existen aristas $a_i = \{x, y_i\}$ perteneciente a hexágonos h_i para $i = 1, 2, 3$ como se muestra en la Figura 5.11. Denotaremos por $i(G)$ el número de vértices internos de G . Un sistema hexagonal G se dice *sistema hexagonal catacondensado* si $i(G) = 0$.

Teorema 5.6.1 Sea G un sistema hexagonal conexo con frontera, entonces

$$\begin{aligned} n(G) + i(G) &= 4h(G) + 2(1 - rk(\pi_1(G))) \\ m(G) + i(G) &= 5h(G) + (1 - rk(\pi_1(G))). \end{aligned} \tag{5.7}$$

Demostración:

Por inducción sobre $i(G)$. Supongamos que $i(G) = 0$, entonces todo hexágono h en G tiene una arista en la frontera. Procedemos por inducción sobre el $rk(\pi_1(G))$. El caso $rk(\pi_1(G)) = 0$, implica que G es una gráfica bencenoide catacondensada y por lo tanto se cumplen las ecuaciones (5.7) (ver (4.1)).

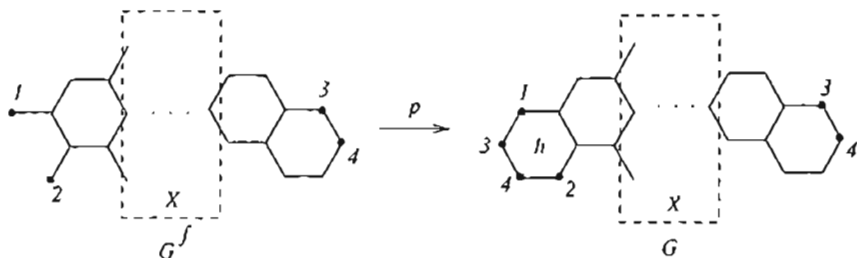


Figura 5.12:

Supongamos que $rk(\pi_1(G)) > 0$, entonces existe una cubierta de Galois $p : K \rightarrow G$ determinada por la acción de \mathbb{Z} . Podemos elegir un dominio fundamental G^f en K como en la sección 5.4, para obtener la situación descrita en la Figura 5.12.

Completando G^f a un sistema hexagonal \bar{G} tenemos

$$\begin{aligned} n(\bar{G}) &= n(G) + 2, \\ m(\bar{G}) &= m(G) + 1, \\ h(\bar{G}) &= h(G), \end{aligned} \tag{5.8}$$

$$rk(\pi_1(\bar{G})) = m(\bar{G}) - h(\bar{G}) - n(\bar{G}) + 1 = rk(\pi_1(G)) - 1.$$

Por hipótesis de inducción, tenemos que

$$\begin{aligned} n(\bar{G}) &= 4h(\bar{G}) + 2(1 - rk(\pi_1(\bar{G}))), \\ m(\bar{G}) &= 5h(\bar{G}) + (1 - rk(\pi_1(\bar{G}))), \end{aligned} \tag{5.9}$$

y una sustitución de (5.8) en (5.9) tenemos el resultado en este caso.

Supongamos que $i(G) > 0$. Afirmamos que existe un hexágono h con una arista $a = \{x, y\}$ y un vértice z tal que a está en la frontera de G y z es un vértice interno de G . En efecto, para cada vértice interno x , sea $l(x)$ la longitud del camino minimal $x = x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} \dots \xrightarrow{a_l} x_l$, con a_l arista sobre la frontera. Sea x_0 un vértice interno con

$$l(x_0) = \min\{l(x) : \text{con } x \text{ vértice interno}\} := l,$$

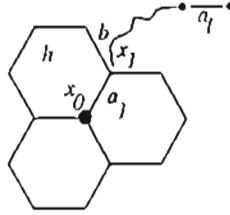


Figura 5.13:

y sea $x = x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} \dots \xrightarrow{a_l} x_l$ el camino con a_l arista sobre la frontera de G , ver Figura 5.13. Ya que $l(x_1) < l(x_0)$, entonces x_1 no es un vértice interno y b (ver Figura 5.13) es una arista sobre la frontera de G , luego h es el hexágono dado en la Figura 5.13.

Definimos ahora el sistema hexagonal G' formado por eliminar aquellas aristas de h sobre la frontera de G . Entonces

$$n(G') = n(G) - j,$$

$$m(G') = m(G) - (j + 1),$$

$$h(G') = h(G) - 1,$$

$$rk(\pi_1(G')) = rk(\pi_1(G)),$$

para algún $0 \leq j \leq 3$. Más aún, $i(G') = i(G) - (4 - j)$. Por hipótesis de inducción tenemos el resultado. \square

El Teorema anterior implica la fórmula del Teorema 5.2.2.

5.6.2. Momento espectral

Una Propiedad estructural de un sistema hexagonal plano G es que cualquier ciclo C es de longitud par y si la longitud es divisible por cuatro, entonces en el interior de C existe un número impar de vértices. Diremos que un sistema hexagonal G es *regular* si todo ciclo C tiene longitud al menos seis y en este caso C define un hexágono en G .

En las secciones 4.4.1 y 4.4.2 estudiamos los momentos espectrales $M_{2k}(H)$ para $2 \leq k \leq 6$ con H una gráfica bencenoide. Por un razonamiento análogo para un sistema hexagonal regular tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned}
 M_4(G) &= 2N_{\{2\}} + 4N_{\{3\}}. \\
 M_6(G) &= 2N_{\{2\}} + 12N_{\{3\}} + 6N_{\{4\}} + 12N_{\{31\}} + 12N_{\{\bar{6}\}}. \\
 M_8(G) &= 2N_{\{2\}} + 28N_{\{3\}} + 32N_{\{4\}} + 72N_{\{31\}} \\
 &\quad + 8N_{\{5\}} + 16N_{\{41\}} + 96N_{\{\bar{6}\}} + 16N_{\{\bar{6}1\}} + 16N_{\{\bar{8}\}}.
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

donde las subgráficas $\{\bar{6}\}$ y $\{\bar{6}1\}$ son dadas en la Figura 4.7 y las subgráficas árboles $\{2\}$, $\{3\}$, $\{4\}$, $\{31\}$, $\{5\}$ y $\{41\}$ están dadas en la Figura 4.6. La subgráfica $\{\bar{8}\}$ es el ciclo de longitud ocho. Observemos que para $\text{rk}(\pi_1(G)) = 0$ (G una gráfica bencenoide), se tiene que $N_{\{\bar{8}\}} = 0$. Es interesante notar que una subgráfica C de G de tipo $\{\bar{8}\}$ es un camino cerrado donde su clase $|C| \neq 1$ en $\pi_1(G)$. El número $N_{\{\Delta\}}$ es el total de subgráficas isomorfas a $\{\Delta\}$ en G .

Proposición 5.6.2 *Sea G es un sistema hexagonal regular. Entonces se cumple:*

1. $M_4(G) = 6n_2(G) + 15n_3(G)$.
2. $M_4(G) = 18m(G) - 12n(G)$.
3. Si G tiene frontera, entonces $M_4(G) = 42h(G) + 6(\text{rk}(\pi_1(G)) - 1) - 6i(G)$.

Donde $n_2(G)$ es el total de vértices de grado dos y $n_3(G)$ el total de vértices de grados tres.

Demostración:

Sabemos que:

$$n(G) = n_2(G) + n_3(G). \quad (5.11)$$

$$2m(G) = 2n_2(G) + 3n_3(G) \quad (\text{Teorema 1.1.1}).$$

Luego

$$n_3(G) = 2m(G) - 2n(G). \quad (5.12)$$

$$n_2(G) = 3n(G) - 2m(G).$$

De la sección 4.4.3 tenemos

$$\begin{aligned} N_{\{2\}} &= m(G). \\ N_{\{3\}} &= n_2(G) + 3n_3(G) = \\ &= 4m(G) - 3n(G). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Usando (5.11), (5.12) y (5.13) en (5.10) para el momento espectral $M_4(G)$ obtenemos 1. y 2.

3. es claro usando el Teorema 5.6.1 y 2. □

La parte 3. del Teorema anterior generaliza la conocida fórmula para sistemas hexagonales catacondensados planos $M_4(G) = 42h(G) - 6$.

Proposición 5.6.3 *Si G es un sistema hexagonal regular con frontera, entonces*

$$rk(\pi_1(G)) = -h(G) + \frac{M_4(G) - 3M_2(G)}{12} + 1.$$

Demostración:

Sabemos de (2.10) y la Proposición 5.6.2 que:

$$M_2(G) = 2m(G) = 10h(G) - 2rk(\pi_1(G)) + 2 - 2i(G).$$

$$M_4(G) = 42h(G) + 6(rk(\pi_1(G)) - 1) - 6i(G).$$

Resolviendo el sistema obtenemos el resultado. □

Sea G un sistema hexagonal con frontera. Para $t \geq 1$ definimos una t -entrada sobre la frontera de G como una trayectoria de longitud $t + 1$:

$$x_0 \xrightarrow{a_1} x_1 \xrightarrow{a_2} x_2 \xrightarrow{\quad} \cdots \xrightarrow{\quad} x_{t-1} \xrightarrow{a_t} x_t \xrightarrow{a_{t+1}} x_{t+1},$$

donde $d(x_0) = d(x_{t+1}) = 2$ y $d(x_j) = 3$ para $j = 1, 2, \dots, t$. Tenemos entonces que 1-entrada es una fisura, 2-entrada es una bahía, 3-entrada es una cueva y una 4-entrada es un fiordo, ver Figura 4.1.

Denotaremos por $B_t(G)$ el número total de las t -entradas de G para $t \geq 1$ y definimos el *total de entradas de G* como:

$$r(G) = \sum_{t \geq 1} B_t(G).$$

Igual que para gráfica bencenoide un sistema hexagonal G tiene tres tipos de aristas, ver sección 4.1. Sea m_{22} el total de aristas que unen vértices de grado dos, m_{23} el total de aristas que unen vértice de grado dos con vértice de grado tres y m_{33} el total de aristas que unen vértices de grado tres.

Lema 5.6.4 *Sea G un sistema hexagonal con frontera y $r(G)$ total de entradas, entonces*

$$m_{22} = n(G) - 2h(G) + 2(1 - rk(\pi_1(G))) - r(G).$$

$$m_{23} = 2r(G).$$

$$m_{33} = 3h(G) - 3(1 - rk(\pi_1(G))) - r(G).$$

Demostración:

Por la definición de una t -entrada, es claro que $m_{23} = 2r(G)$.

Por (5.12) y Teorema 5.6.1 tenemos que $n_3(G) = 2(h(G) - (1 - rk(\pi_1(G))))$. Y como $m_{23} + 2m_{33} = 3n_3(G)$ obtenemos el valor de m_{33} .

Usando que $m_{22} + m_{23} + m_{33} = m(G) = h(G) + n(G) - (1 - rk(\pi_1(G)))$ la última ecuación es despejando $m(G)$ en el Teorema 5.2.2 y despejando la ecuación anterior obtenemos el valor de m_{22} . \square

El Lema anterior es una generalización del Lema 4.1.1 para gráfica bencenoide.

Proposición 5.6.5 *Sea G un sistema hexagonal regular con frontera, $\tau(G)$ total de entradas. Entonces*

$$M_6(G) = 146m(G) - 126n(G) + 12(1 - rk(\pi_1(G))) - 6\tau(G).$$

Demostración:

Sabemos de (5.10) que:

$$M_6(G) = 2N_{\{2\}} + 12N_{\{3\}} + 6N_{\{4\}} + 12N_{\{31\}} + 12N_{\{\bar{6}\}}. \quad (5.14)$$

Los valores de $N_{\{2\}}, N_{\{3\}}$, están dados en (5.13). De la sección 4.4.3 tenemos que

$$N_{\{4\}} = m_{22} + 2m_{23} + 4m_{33}.$$

$$N_{\{31\}} = n_3(G) = 2m(G) - 2n(G).$$

$$N_{\{\bar{6}\}} = h(G) = m(G) - n(G) + (1 - rk(\pi_1(G))).$$

El valor de $N_{\{\bar{6}\}}$ es claro por el Teorema 5.6.1 y por ser G un sistema hexagonal regular. Usando el Lema 5.6.4 para el valor de $N_{\{4\}}$, obtenemos

$$\begin{aligned} N_{\{4\}} &= n(G) + 10h(G) - 10(1 - rk(\pi_1(G))) - \tau(G) = \\ &= 10m(G) - 9n(G) - \tau(G). \end{aligned}$$

Reemplazando las estimaciones de $N_{\{2\}}, N_{\{3\}}, N_{\{4\}}, N_{\{31\}}$ y $N_{\{\bar{6}\}}$ en (5.14) obtenemos el valor que queremos de $M_6(G)$. \square

La fórmula para $M_6(G)$ de la proposición anterior es una generalización de la fórmula $M_6(G)$ con G una gráfica bencenoide obtenida en la sección 4.5, ecuación (4.29).

Para la consideración del momento $M_8(G)$ de un sistema hexagonal G introducimos la siguiente notación $m_{ijk}(G)$ es el número de trayectorias en G con sucesión de grado (i, j, k) para $i, j, k \in \{2, 3\}$.

Es claro que $m_{232}(G) = f(G)$ con $f(G)$ el total de fisuras de G y $m_{323}(G) = a(G)$ con $a(G)$ el número de pares de t -entradas en G que tienen un vértice de grado dos en común. Tengamos presente las siguientes ecuaciones entre los invariantes de un sistema hexagonal G :

$$m(G) = n(G) + h(G) - (1 - rk(\pi_1(G))).$$

$$n_3(G) = 2(h(G) - (1 - rk(\pi_1(G)))). \quad (5.15)$$

$$i(G) = 4h(G) + 2(1 - rk(\pi_1(G))) - n(G).$$

Lema 5.6.6 Sea G un sistema hexagonal con $n(G)$ vértices, $m(G)$ aristas y $h(G)$ hexágonos $h(G) \geq 2$. Entonces

1. $m_{33} + 2m_{323} + 3m_{3223} + 4m_{32223} + 5m_{322223} = n(G) + h(G) - (1 - rk(\pi_1(G)))$.
2. $m_{33} + m_{323} + m_{3223} + m_{32223} + m_{322223} = 3(h(G) - (1 - rk(\pi_1(G))))$.

donde $m_{32\dots 23}$ es el número de trayectorias de sucesión de grado $(3, 2, \dots, 2, 3)$.

Demostración:

Es claro que

$$m(G) = m_{33} + \sum_{i=1}^4 (i+1) m_{3\underbrace{22\dots 2}_i 3}$$

ya que cada trayectoria de sucesión de grado $(3, \underbrace{2, 2, \dots, 2}_i, 3)$ tiene $i+1$ aristas externas. Luego 1. se sigue de (5.15).

Tenemos que

$$n_2(G) = \sum_{i=1}^4 i \cdot \left(m_{3\underbrace{22\dots 2}_i 3} \right) = n(G) - n_3(G)$$

ya que toda trayectoria de sucesión de grado $(3, \underbrace{2, 2, \dots, 2}_i, 3)$ tiene i vértices de grado dos. Por lo tanto, por la ecuación de la parte 1. y por (5.15) concluimos que

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^4 m_{3\underbrace{22\dots 2}_i 3} &= \sum_{i=0}^4 (i+1) m_{3\underbrace{22\dots 2}_i 3} - \sum_{i=1}^4 i \cdot m_{3\underbrace{22\dots 2}_i 3} \\ &= n(G) + h(G) - (1 - rk(\pi_1(G))) - (n(G) - n_3(G)) \\ &= 3(h(G) - (1 - rk(\pi_1(G)))) \end{aligned}$$

□

Por un procedimiento análogo que en [37] y los Lemas 5.6.4 y 5.6.6 obtenemos las siguientes relaciones para un sistema hexagonal G con $n(G)$ vértices,

$h(G)$ hexágonos, $f(G)$ fisuras, $r(G)$ total de entradas $a(G)$ total de pares de t -entradas con un vértice de grado dos en común

$$\begin{aligned}
 m_{222}(G) &= m_{32223} + 2m_{322223} \\
 &= (4 - 3)m_{32223} + (5 - 3)m_{322223} \\
 &= (4m_{32223} + 5m_{322223}) - 3(m_{32223} + m_{322223}) \\
 &= n(G) - 2h(G) - 2r(G) + a(G) + 2(1 - rk(\pi_1(G))). \\
 \\
 m_{223}(G) &= 2m_{3223} + 2m_{32223} + 2m_{322223} \\
 &= 2(m_{3223} + m_{32223} + m_{322223}) \\
 &= 2(r(G) - a(G)). \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m_{233}(G) &= 2f(G) + 4(r(G) - f(G)) \\
 &= 4r(G) - 2f(G).
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m_{333}(G) &= 6h(G) - 6m_{322223} - 5m_{32223} - 4m_{3223} - 3m_{323} \\
 &\quad + \sum_{t \geq 3} (t - 2) \cdot B_t(G) \\
 &= 6h(G) - 4r(G) + f(G) - 6(1 - rk(\pi_1(G))).
 \end{aligned}$$

Proposición 5.6.7 *Sea G un sistema hexagonal regular con frontera, $r(G)$ total de entradas, $f(G)$ total de fisuras, $N_{\{\bar{8}\}}$ total de ciclos de longitud ocho. Entonces lo siguiente se cumple:*

$$\begin{aligned}
 M_8(G) &= 1186 m(G) - 1140 n(G) + 192 (1 - rk(\pi_1(G))) \\
 &\quad - 96 r(G) + 8 f(G) + 8 m_{222}(G) + 16N_{\{\bar{8}\}}.
 \end{aligned}$$

Demostración:

Sabemos de (5.10) que:

$$\begin{aligned}
 M_8(G) &= 2N_{\{2\}} + 28N_{\{3\}} + 32N_{\{4\}} + 72N_{\{31\}} \\
 &\quad + 8N_{\{5\}} + 16N_{\{41\}} + 96N_{\{\bar{6}\}} + 16N_{\{\bar{6}1\}} + 16N_{\{\bar{8}\}}. \tag{5.17}
 \end{aligned}$$

Estimaremos sólo los valores $N_{\{5\}}$, $N_{\{41\}}$ y $N_{\{\bar{6}1\}}$, ya que las estimaciones de $N_{\{2\}}$, $N_{\{3\}}$, $N_{\{4\}}$, $N_{\{31\}}$ y $N_{\{\bar{6}\}}$ están dadas en la demostración de la Proposición anterior. Es claro que:

$$\begin{aligned}
 N_{\{5\}} &= m_{222} + 2m_{223} + 2m_{233} + m_{232} + 4m_{323} + 4m_{333}. \\
 \\
 N_{\{41\}} &= m_{23} + 4m_{33}. \tag{5.18} \\
 \\
 N_{\{\bar{6}1\}} &= 6h(G) - m_{222} - m_{223} - m_{323}.
 \end{aligned}$$

Sustituyendo los valores de (5.16) en (5.18) y por el Teorema 5.6.1 obtenemos:

$$\begin{aligned} N_{\{5\}} &= 24h(G) - 24(1 - \tau k(\pi_1(G))) - 4r(G) + f(G) + m_{222} = \\ &= 24m(G) - 24n(G) - 4r(G) + f(G) + m_{222}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_{\{41\}} &= 12h(G) - 12(1 - \tau k(\pi_1(G))) - 2r(G) = \\ &= 12m(G) - 12n(G) - 2r(G). \end{aligned} \tag{5.19}$$

$$\begin{aligned} N_{\{\bar{6}1\}} &= 8h(G) - n(G) - 2(1 - \tau k(\pi_1(G))) = \\ &= 8m(G) - 9n(G) + 6(1 - \tau k(\pi_1(G))). \end{aligned}$$

Reemplazando las estimaciones (5.19) y las estimaciones de la demostración de la Proposición anterior en (5.17) obtenemos el valor de $M_8(G)$. \square

Si G es un sistema hexagonal, el índice de Randić (sección 2.3) de G viene dado por:

$${}^1\chi(G) = \frac{m_{22}}{2} + \frac{m_{23}}{\sqrt{6}} + \frac{m_{33}}{3}. \tag{5.20}$$

Proposición 5.6.8 *Si G es un sistema hexagonal con $n(G)$ vértices y $r(G)$ total de entradas de G , entonces*

$${}^1\chi(G) = \frac{n(G)}{2} - \frac{5 - 2\sqrt{6}}{6} r(G).$$

Demostración:

Usando el Lema 5.6.4 en (5.20) obtenemos el resultado. \square

De la Proposición anterior tenemos que índice de Randić para gráficas bencenoides se generaliza para sistemas hexagonales en general.

5.6.3. Energía de un sistema hexagonal con frontera

En la sección 4.6, obtuvimos cotas inferiores para la π -energía $E_\pi(G)$. Estas cotas se cumplen directamente para sistemas hexagonales en general y tenemos el siguiente resultado.

Proposición 5.6.9 *Sea G un sistema hexagonal, entonces se cumple:*

1. *Si q, t, s son enteros positivos pares y $4q = t + s + 2$, entonces*

$$M_q^2 (M_t M_s)^{-1/2} \leq E_\pi(G).$$

En particular, para $(2, 2, 4)$ y $(4, 6, 8)$, obtenemos:

$$2\sqrt{2} m \sqrt{\frac{m}{M_4}} \leq E_\pi(G) \quad \text{y} \quad \frac{M_4^2}{\sqrt{M_6 M_8}} \leq E_\pi^2(G).$$

2. $(16/27)^{1/2} \sqrt{2nm} \leq E_\pi(G)$. (Corolario 4.6.5).

□

En la sección 2.4.1, vimos que

$$E_\pi(G) \approx E_\pi(L) = \sum_{i=0}^L \alpha_{2i} M_{2i}(G) - \alpha_0 \eta(G),$$

donde $\eta(G)$ es la multiplicidad del cero en $\text{Spec}(G)$ y

$$\alpha_0 = \frac{1}{\pi} \frac{6}{2L+1},$$

$$\alpha_{2i} = (-1)^{i+1} \frac{1}{\pi} \frac{2^{2i+1}}{3^{2i-1}} \frac{(L+i)!}{(2L+1)(2i-1)(2i)!(L-i)!}.$$

Para un sistema hexagonal regular G y $L = 2, 3, 4$ tenemos que:

$$E_\pi(2) = -0,02515041076M_4 + 0,5092958178M_2 + 0,3819718633M_0 \\ -0,38197186\sigma(G)$$

o

$$E_\pi(2) = 0,56588424m + 0,68377679n - 0,38197186\sigma(G).$$

Para $L = 3$

$$E_\pi(3) = 0,0047905544M_6 - 0,0898228956M_4 + 0,7275654545M_2 \\ + 0,2728370452M_0 - 0,27283704\sigma(G).$$

o

$$E_\pi(3) = 0,53773973m + 0,747101193n + 0,057486653(1 - rk(\pi_1(G))) \\ - 0,028743326t - 0,27283704\sigma(G).$$

Para $L = 4$

$$E_\pi(4) = -0,0011828529M_8 + 0,026081907M_6 - 0,20958675M_4 \\ + 0,94314040M_2 + 0,21220659M_0 - 0,21220659\sigma(G)$$

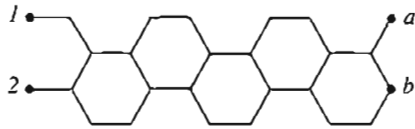
o

$$E_\pi(4) = 0,5188140m + 0,7893796n + 0,08587512(1 - rk(\pi_1(G))) \\ - 0,04293756t - 0,0094628235(f + m_{222}) - 0,018925646N_{\{8\}} \\ - 0,21220659\sigma(G).$$

5.6.4. Ejemplo

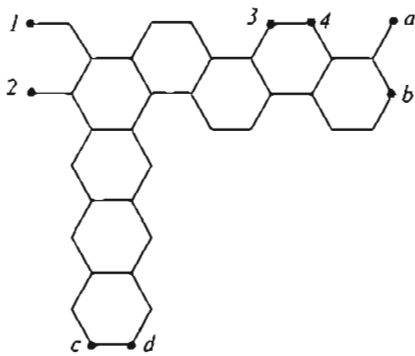
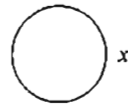
Consideremos los sistemas hexagonales G de la Figura 5.14 (obtenidos identificando los vértices marcados con el mismo número). Indicamos las correspondientes gráficas anudadas Δ_G y las valuaciones v_G .

En la Tabla 5.1, mostramos los valores de varios invariantes gráficos de los sistemas hexagonales de la Figura 5.14. En la mayoría de los ejemplos, $E_\pi(4)$ es una buena aproximación para la π -energía $E_\pi(G)$.



(I) $a=1, b=2, x=0.$

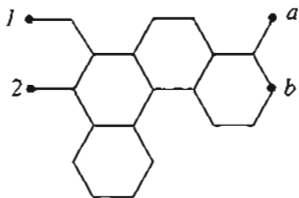
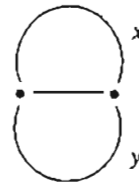
(II) $a=2, b=1, x=1.$



(III) $a=1, b=2, c=3, d=4. x=0, y=0.$

(IV) $a=1, b=2, c=4, d=3. x=0, y=1.$

(V) $a=2, b=1, c=4, d=3. x=1, y=1.$



(VI) $a=1, b=2. x=0.$

(VII) $a=2, b=1. x=1.$

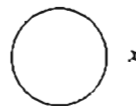


Figura 5.14: Sistemas hexagonales.

	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(VI)	(VII)
$m(G)$	30	30	44	44	44	25	25
$n(G)$	24	24	34	34	34	20	20
$\eta(G)$	0	0	0	0	0	0	0
$rk(\pi_1(G))$	1	1	2	2	2	1	1
$r(G)$	6	7	10	10	11	4	5
$f(G)$	0	2	4	4	5	0	1
$m_{222}(G)$	0	0	0	0	0	2	2
$N_{\{8\}}$	0	0	0	0	0	7	6
$M_4(G)$	252	252	384	384	384	210	210
$M_6(G)$	1320	1314	2068	2068	2062	1106	1100
$M_8(G)$	7644	7564	12304	12304	12216	6594	6490
$\sqrt{\frac{32nm}{27}}$	29.21	29.21	42.107	42.107	42.107	24.343	24.343
$2m\sqrt{\frac{2m}{M_4}}$	29.27	29.27	42.126	42.126	42.126	24.398	24.398
$E_\pi(2)$	33.387	33.387	48.147	48.147	48.147	27.823	27.823
$E_\pi(3)$	33.890	33.861	48.717	48.717	48.688	28.271	28.242
$E_\pi(4)$	34.252	34.190	49.114	49.114	49.061	28.435	28.401
$E_\pi(G)$	34.435	34.405	49.349	49.289	49.255	28.599	28.646

Cuadro 5.1: Invariantes gráficos de los sistemas hexagonales de la Figura 5.14

Bibliografía

- [1] Araujo, O. and de la Peña, J. A. Some bounds for the connectivity index of a chemical graph, *J. Chem. Inf. Comput. Sci*, 1998, 38, 827-831.
- [2] Araujo, O. and de la Peña, J. A. The connectivity index of a weighted graph, *Linear Algebra and its Applications*, 283(1998)171-177.
- [3] Biggs, N. *Algebraic Graph Theory*, Cambridge University, 1974.
- [4] Chung, F. *Spectral Graph Theory*, Conference Board on Math. Sc. 92 AMS, 1996.
- [5] Curtis, C. W. *Linear Algebra; An Introductory Approach*, Springer-Verlag, 1984.
- [6] Cvetković, D. M. Doob, M. Sachs, H. *Spectra of Graphs*, Academic Press, 1979.
- [7] Cyvin, S. J. and Gutman, I. *Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [8] Dietrich-Buchecker, C. and Sauvage, J. P. A synthetic molecular trefoil knot. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 28(1989), 189-192.
- [9] Flapan, E. *When Topology Meets Chemistry*, Cambridge University Press, 2000.
- [10] Gross, J. and Tucker, T. *Topological Graph Theory*. Dover Publications, INC. 1987.
- [11] Gutman, I. and Cyvin, S. J. *Introduction to the theory of Benzenoid Hydrocarbons*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [12] Gutman, I. and Polansky, O. E. *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*, Springer-Verlag, 1986.

-
- [13] Gutman, I. Total π -electron energy of benzenoid hydrocarbons, Topics in currents chemistry, Vol 162, Springer-Verlag, 1992.
- [14] Gutman, I. Topological properties of benzenoid systems, Topics in currents chemistry, Vol 162, Springer-Verlag, 1992.
- [15] Gutman, I. McClelland-type lower bound for total π -electron energy, J. Chem. Soc. Faraday, 1990, 86(20), 3373-3375.
- [16] Gutman, I. The energy of a graph: Old and new results, Algebraic Combinatorics and Applications, Springer, Berlin, 2001, 196-211.
- [17] Hall, G. G. The bond orders of alternant hydrocarbon molecules, Proc Roy Soc (1955) 229:251.
- [18] Hall, G. G. The evaluation of moments for polycyclic hydrocarbons, Theor Chim Acta (1986) 70:323-332.
- [19] Hansen, P. and Jurs, P. Chemical Applications of Graph Theory: Part 1. Fundamentals and topological indices, Journal of Chemical Education, 1988, 65, 574-580.
- [20] Harary, F. Graph Theory, Addison-Wesley, 1969.
- [21] Harris, P. J. F. Carbon Nanotubes and Related Structures, Cambridge University Press, 1999.
- [22] Jiang, Y. Zhu, H. Zhang, H. and Gutman, I. Moment expansion of Hückel molecular energies, Chemical Physics Letters, Vol 159, No: 2,3 (1989) 159-164.
- [23] Jiang, Y. Qian, X. and Shao, Y. The evaluation of moments for benzenoid hydrocarbons, Theor Chim Acta (1995) 90:135-144.
- [24] Jiang, Y. and Zhang, H. Stability and reactivities based on moment analysis, Theor Chim Acta (1989) 75:279-297.
- [25] Jiang, Y. Tang, A. and Hoffman, R. Evaluation of moments and their application in Hückel molecular orbital theory, Theor Chim Acta (1984) 66:183-192.
- [26] Lickorish, R. An Introduction to Knot Theory, Springer, 1997.

-
- [27] Massey, W. Algebraic Topology: An Introduction, Harcourt, Brace and World, Inc, 1967.
- [28] McClelland, B. Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π -electron energies, *J. of Chem. Phys.* 54(1971) 640-643.
- [29] Morales, D. and Araujo, O. On the search for the best correlation between graph theoretical invariants and physicochemical properties, *Journal of Mathematical Chemistry*, 13(1993) 95-106.
- [30] de la Peña, J. A. Algebra Lineal Avanzada, Ediciones Científicas Universitarias, 1996.
- [31] de la Peña, J. A and Takane, M. The spectral radius of the Galois covering of a finite graph, *Linear Algebra and Its Application* 160:175-188. 1992.
- [32] de la Peña, J.A. On the abelian Galois covering of an algebra, *Journal of Algebra*, 102, 129-134 (1986).
- [33] de la Peña, J. A. Mendoza, L. and Rada, J. Comparing momenta and π -electron energy of benzenoid molecules. por aparecer.
- [34] de la Peña J. A and Martinez-Villa, R. The universal cover of a quiver with relations, *Journal of Pure and Applied Algebra*, 30, 277-292. 1983.
- [35] Rada, J. Araujo, O. and Gutman, I. Randić index of benzenoid systems and phenylenes, *Croatica Chemica Acta CCACAA* 74(2) 225-235 (2001).
- [36] Rada, J. Bounds for the Randić index of catacondensed systems, *Utilitas Math.* 62(2002) 155-162.
- [37] Rada, J. Second order Randić index of benzenoid systems, *ARS Combinatoria* 72(2004) 77-88.
- [38] Randić, M. On characterization of molecular branching, *J. Am. Chem. Soc.* 1975, 97, 6609-6615.
- [39] Sachs, H. Perfect matchings in hexagonal systems, *Combinatorica* 4(1)(1984)89-99.
- [40] Terrones, H. Nano estructura con curvatura, *Ciencia, revista de la Academia Mexicana de Ciencias*, Vol 54, No 1, enero-marzo 2003, 40-52.

-
- [41] Trinajstić, N. Chemical Graph Theory, Vol: I y II, CRC Press, Boca Raton 1983.
- [42] Walba, D. Richards, R. and Haltiwanger, R. C. Total synthesis of the first molecular Möbius band. J. Am. Chem. Soc. 104(1982), 3219-3221.
- [43] Wasserman, E. Chemical Topology. Sci. Am. 207(1962), 94-100.
- [44] Yamada, S. An invariant of spatial graphs, Journal of Graph Theory, Vol 13, No 5, 537-551. 1989.
- [45] Yokota, Y. Topological invariants of graphs in 3-space. Topology vol 35, No 1, 1996, 77-87.