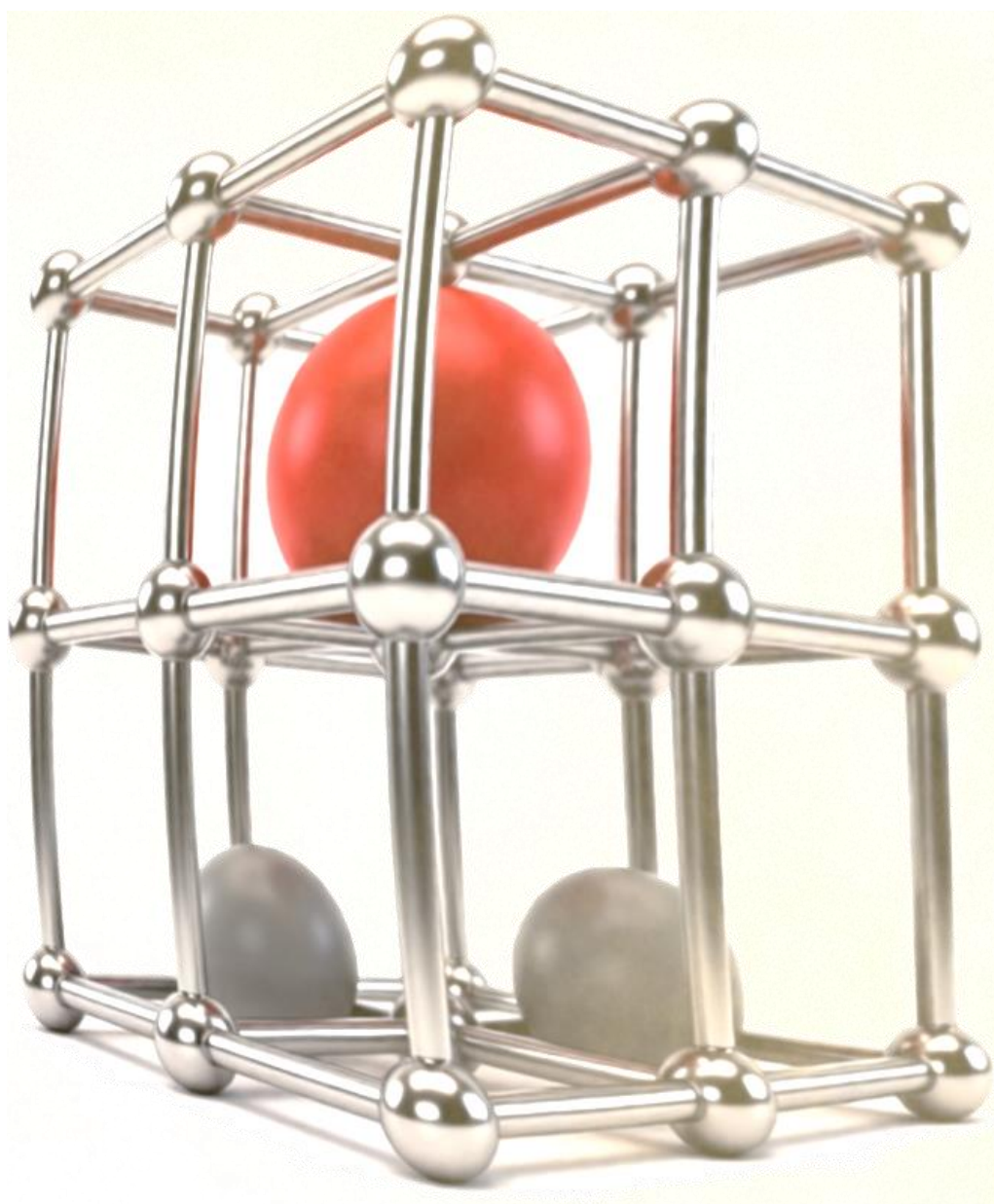


Dan-Marian Joița

Metode de căutare a similitudinilor moleculare cu
aplicații în sistemele de stocare a energiei



**EDITURA
UNIVERSITĂȚII
DIN ORADEA**

Joita Dan-Marian

**Metode de căutare a similitudinilor moleculare cu
aplicații în sistemele de stocare a energiei**

Editor: Lorentz Jäntschi

Editura Universității din Oradea

Oradea, 2026

Referenții științifici:

Ș. I. univ. dr. Alina - Claudia Groze, Universitatea din Oradea

Conf. univ. dr. Liviu - Călin Bolunduț, Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca

ISBN: 978-606-10-2502-2

Redactor: Roxana Ivașca

Coperta: Dan-Marian Joița

Cuprins

I. 	Introducere	8
II. 	Generalități	12
II.1.	Sisteme de stocare a energiei	12
II.1.1.	Descoperiri inițiale	12
II.1.2.	Definiții și principii de bază	12
	Cupluri redox	12
	Componente	13
II.1.3.	Primele sisteme de stocare a energiei electrice	15
II.1.4.	Îmbunătățiri semnificative	16
II.1.5.	Tipuri de sisteme de stocare a energiei	17
II.1.6.	Etape determinante	17
II.1.7.	Tendențe și perspective emergente	18
II.2.	Modelare computațională	19
II.2.1.	Corelații Structură-Proprietăți	20
II.2.2.	Similitudini	23
III. 	Metode - Polinoame în chimie	26
III.1.	Polinomul Caracteristic	28
	Extinderea polinomului caracteristic	31
III.2.	Polinomul permanent	36
III.3.	Polinomul de potrivire	37
III.4.	Polinomul Hosoya	38
III.5.	Polinoame imanante	40
III.6.	Polinomul laplacian	42
III.7.	Polinoame Zagreb	43
III.8.	Polinomul sextetului	43
III.9.	Polinomul de independență	44
III.10.	Polinoame King și domino	45
III.11.	Polinomul Cluj	46

III.12. Polinomul omega	48
III.13. Polinomul Wheland	49
III.14. Polinomul μ	50
III.15. Polinomul FP	51
III.16. Polinomul β	49
III.17. Polinomul ciclic (Knop și Trinajstić)	53
III.18. Polinomul cromatic	54
III.19. Polinomul Tutte	56
III.20.	50
Polinomul informațional	57
Polinomul orbital	58
Polinomul B	58
Polinomul de acoperire Clar	58
Polinoame de forțare și anti-forțare	59
IV. Polinomul caracteristic în căutarea de similitudini	59
V. Concluzii și perspective	69
Bibliografie	72

Prefață

Mințile umane și computerele încetinesc în diferite moduri ritmul dezvoltărilor care, din nefericire, a explodat doar în timpul războaielor. Din nevoia de a surprinde oponentul cu un nou mod de luptă pentru a-i contracara unele avantaje greu de depășit, jocul trebuie schimbat. Numărul de resurse disponibile precum cele umane a fost înlocuit de drone. Dacă dispăre nevoia, dispăre și progresul. Este posibil ca unele mecanisme de dezvoltare să devină ineficiente prin permeabilitatea sistemului pentru persoane neperformante și lipsa nevoii imediate de a găsi soluții. Creativitatea poate fi soluția la această problemă, dar nu valorează nimic fără cunoștințe. În acest sens, computerele pot găsi modele altfel imposibil de recunoscut într-o viață de om însă și acestea au resurse limitate. Programarea automată poate găsi motivele din care codul folosește resurse degeaba – un calcul ce influențează infim rezultatul și enorm performanța. O minte strălucită strecurată în sistem poate observa evidența și valoarea modelului descoperit de computer. De multe ori aceste persoane sunt incomode unui sistem ajuns la lenevire astfel încât se poate apela la alte mecanisme din exteriorul sistemelor. În trecut exista o barieră pentru copiii superdotați, și anume lipsa unei îndrumări modeste măcar. Cu accesul instant și gratuit la resurse educative, problema este rezolvată. Inteligența artificială poate rezuma și preda cantități mari de informații, iar copilul lipsit de îndrumarea necesară va trebui să caute resurse gratuite, recenzate și valoroase. Chiar dacă doar 10% sunt valoroase, important este că poate.

În cazul de față sistemul a produs o cercetare cu rezultate negative, în sensul că deocamdată nu se pot fructifica. Energia depusă a produs cel puțin o lecție de matematică aplicată. Această lecție a fost rezumată, recenzată, publicațiile sunt gratuite, iar acum este tradusă și publicată cu aceeași disponibilitate gratuită. A lipsit energia necesară pentru a expune rezultatele numerice și interpretarea. Importantă este perseverența și lăsarea cât mai multor detalii pentru alții care vor să continue când totuși renunți. Drumurile înfundate pot fi un portal spre viitor când ajung în mâinile unui mic geniu, sau inteligența artificială va găsi aplicația potrivită.

Contribuții

Cartea de față este derivată din versiunea în limba română a tezei de doctorat, susținută în limba engleză, în data de 15 martie 2024, la Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică, Universitatea „Babeș - Bolyai” din Cluj-Napoca, realizată sub coordonarea științifică a domnului prof. univ. dr. habil. Lorentz Jäntschi, editorul prezentei ediții, aceasta fiind completată de exemple de alte polinoame asemănătoare articolelor publicate în conformitate cu cerințele obținerii calității de doctor. Articolele la care se face trimitere în această lucrare sunt realizate de autor, sub îndrumarea domnului profesor Lorentz Jäntschi. Contribuțiile altor persoane sunt identificate în secțiunea contribuții a fiecărei lucrări publicate. Orice informație identică lucrărilor citate este de natură științifică și nu poate fi alterată fără a altera realitatea. Rezultatele matematice sunt, de asemenea, o necesitate și este normal și de dorit să fie identice.

Pe această cale, aducem mulțumirile noastre domnului prof. univ. dr. habil. Lorentz Jäntschi, pentru îndrumare și expertiză, și pentru generozitatea de a accepta să fie editorul acestei cărți.

I. Introducere

Înțelegerea similitudinilor dintre compușii implicați în echilibrele redox ale sistemelor de stocare a energiei va accelera dezvoltarea domeniului. Se pot descoperi materiale care prezintă proprietăți dezirabile precum densitate mare de energie, rate rapide de încărcare/descărcare, viață lungă, eficiență electrochimică sau integrare.

Similitudinile ar putea oferi informații despre geometria atomilor într-un compus. Prin identificarea compușilor ce prezintă geometrii similare cu alte materiale de înaltă densitate energetică, se pot explora alternative care pot prezenta capacități de stocare a energiei asemănătoare sau îmbunătățite [1].

Compușii cu geometrii similare pot prezenta următoarele proprietăți asemănătoare:

- rate de încărcare/descărcare, permițând stocarea și eliberarea mai rapidă a energiei datorită cineticii reacțiilor redox și proceselor de transfer de electroni;
- stabilitate structurală, rezistență la degradare și performanță ciclică;
- potențiale redox și caracteristici de transfer de sarcină, conducând la o eficiență electrochimică îmbunătățită [2].

Similitudinile ar putea servi ca bază pentru proiectarea rațională a noilor compuși cu proprietăți adaptate. Prin valorificarea cunoștințelor compușilor cu geometrii cunoscute și a performanței acestora în sistemele de stocare a energiei, se ajută în proiectarea și sintetizarea de noi compuși cu geometrii specifice optimizate pentru funcționalitățile dorite. Materiale avansate ale anodului și catodului au fost studiate intens [3] și am dori să adoptăm o altă abordare. Această abordare poate accelera descoperirea și dezvoltarea de noi materiale pentru aplicații de stocare a energiei [4].

Studiind compuși cu geometrii cunoscute și performanța acestora în sistemele de stocare a energiei, se pot stabili relații structură-proprietate.

Efortul nostru ar putea ajuta la filtrarea eficientă a unei game largi de compuși și la identificarea candidaților promițători pentru investigații experimentale ulterioare sau la selectarea materialelor precursorare adecvate și a căilor de sinteză pentru a produce compuși cu geometrii și proprietăți dorite.

Cronologic, sistemele de stocare a energiei au fost inventate înaintea computerelor. Începem cu originile lor, istoria, pașii importanți, încorporăm definiții, principii, o fotografie detaliată a mecanismului, îmbunătățiri, tipuri ale acestor sisteme și tendințe care s-ar putea dovedi valoroase. Prima lecție de istorie cu 31 de exemple se încheie în anii 1970 cu dezvoltarea practică a chimiei litiu-ion reîncărcabile, deoarece acel moment marchează o avalanșă de interes pentru sistemele de stocare a energiei.

Volumul mare de date ne-a adus în această situație în care este greu să ținem cont și să comparăm totul. Cantitatea de cunoștințe a depășit din ce în ce mai multe granițe. Acest lucru este dezirabil, dar s-a întâmplat un lucru nedorit: cine/ce poate lua în considerare totul? Bazele de date pot fi folosite pentru a procesa această cantitate de informații. Dorim să contribuim la acest efort.

Modelarea computațională a adus unele contribuții chimiei de-a lungul anilor, cum ar fi: eficiență și rentabilitate, proiectare și optimizare a materialelor, predicția proprietăților materialelor, analiză și vizualizare facilă. Acesta din urmă este locul în care ne oprim și încercăm să aducem o contribuție. Sunt menționate câteva metode de calcul și sunt introduși indecși topologici. O a doua lecție de istorie prezintă indecșii topologici, deoarece polinoamele sunt indecși topologici și descriptori moleculari.

Contribuția acestei cărți începe să fie mai practică în **Capitolul III. Metode**. Sunt prezentate exemple simple despre cum se calculează unele polinoame pentru un compus de interes. Polinomul caracteristic al LiMn_2O_4 este calculat folosind metoda lui Sachs. Sunt prezentate și alte peste 20 de polinoame.

Modalitățile în care polinomul caracteristic poate fi extins sunt prezentate în secțiunea următoare. Unele dintre aceste exemple ar putea fi folosite pentru a înlocui părți ale algoritmului din **Capitolul IV**.

Există o varietate de strategii numerice aplicate și recent actualizate: descompunerea Adomian [5], extrapolarea Aitken [6], biseția [7], metode precum Chebyshev–Halley [8], Chun–Neta [9], co-locarea [10], Galerkin [11], perturbarea homotopiei [12], Jarratt [13], Newton–Raphson [14], Osada [15], Traub–Steffensen [16] sau Ostrowski [17], formule de cuadratură [18,19], super-Halley [20] și Thukral [21], iterații Nash–Moser [22] și Picard [23].

Iterațiile în mai multe puncte depășesc limitările algoritmilor cu un punct, demonstrând rate de convergență superioare și eficiență computațională, devenind astfel cea mai puternică tehnică pentru găsirea rădăcinilor. Dezvoltarea metodelor iterative pentru găsirea rădăcinilor ecuațiilor neliniare deține o poziție crucială în domeniul analizei numerice, generând interes și semnificație considerabile. Metoda Newton-Raphson este o abordare renumită iterativă care operează fără memorie, definită după cum urmează [24]:

$$s_{n+1} = s_n - \frac{\theta(s_n)}{\theta'(s_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Algoritmul de găsire a similitudinilor compușilor cu aplicații în sistemele de stocare a energiei și rezultatele acestuia sunt prezentate în **Capitolul IV**, folosind concepte precum:

- Bazele de date – colecții structurate de date care facilitează stocarea, extragerea și gestionarea eficientă a datelor. Ele pot stabili relații între diferite entități de date, permițând reprezentarea structurilor și asocierilor de date complexe.
- Alinierea structurală presupune suprapunerea structurilor tridimensionale ale compușilor pentru a identifica regiunile de similitudine structurală și pentru a cuantifica diferențele în aranjamentele lor spațiale.
- Matricele pătratică (având un număr egal de coloane și rânduri) sunt fundamentale în studiul operațiilor matriceale, determinanților, inverselor și valorilor proprii.
- O matrice antisimetrică, cunoscută și sub numele de matrice simetrică oblică, este o matrice pătrată a cărei transpusă este egală cu negativul său. Toate componentele sunt anti-

simetrice (semnele lor diferă) față de diagonala principală :

$$\begin{matrix} & 0 & a & b \\ -a & 0 & c & \\ -b & -c & 0 & \end{matrix}$$

- Valorile proprii ale unei matrice antisimetrice sunt pur imaginare sau zero. Interpolarea presupune construirea unei funcții care trece exact prin punctele date, permițând estimarea valorilor la poziții intermediare.
- Trilaterarea este o tehnică geometrică folosită pentru a determina poziția unui anumit punct prin măsurarea distanței acestuia de la trei puncte de referință predeterminate.

Se prezintă modul în care alte programe aliniază. Problema proprie este definită și aceste valori proprii ale matricei sunt rădăcinile polinomului caracteristic. Extinderea polinomului caracteristic la fiecare coordonată carteziană este utilizată pentru a roti, transla și reflecta până când compusul candidat ajunge într-o poziție cu cele mai ridicate valori proprii absolute pentru coordonatele carteziane. Candidați ce prezintă similitudini sunt găsiți prin compararea sumelor pătratelor valorilor proprii ale întregului compus sau combinații de atomi. Algoritmul valorilor proprii aliniază candidații. Toți atomii eliminați anterior acum sunt atașați folosind un script de trilaterare găsit în literatură. Se găsește o aproximare pentru polinomul caracteristic al matricei distanțelor carteziane pe Ox. În cele din urmă, o sumă este calculată folosind legea mișcării de rotație a unui corp în jurul unei axe fixe.

Există un număr de extensii de fișiere utilizate în chimie, de exemplu:

- „.mol” sau „.sdf”: aceste extensii de fișiere sunt utilizate pentru stocarea datelor de structură moleculară, inclusiv informații despre atomi, legături și coordonate 3D.
- „.cif”: Formatul fișierului de informații cristalografice este utilizat pentru a stoca date cristalografice, inclusiv informații despre coordonatele atomice, parametri celulei unitare și operațiile de simetrie ale materialelor cristaline. Acest tip de fișier încearcă să ofere date cristalografice mai demne de încredere și mai accesibile; este tipic exemplar în îmbinarea datelor și informațiilor textuale pentru comunicarea în știință.
- „.xyz”: această extensie de fișier este adesea folosită pentru stocarea coordonatelor moleculare într-un format simplu bazat pe text.
- „.pdb”: Formatul de fișier Protein Data Bank este utilizat pentru a stoca informații despre structurile 3D ale macromoleculelor biologice, cum ar fi proteinele și acizii nucleici.
- „.jdx”: Această extensie de fișier este utilizată pentru stocarea datelor spectrale, cum ar fi spectre de rezonanță magnetică nucleară (NMR) și infraroșu (IR), în formatul JCAMP-DX utilizat în mod obișnuit în spectroscopie.
- „.mzML”: Această extensie de fișier este utilizată pentru stocarea datelor de spectrometrie de masă în formatul standard deschis mzML, care permite schimbul de date de spectrometrie de masă între diferite instrumente software.

Există posibilitatea ca algoritmul dezvoltat să poată fi utilizat pentru a alinia orice în spațiul 3D. Sunt posibile mai multe geometrii pentru un anumit compus. Aceste geometrii vor fi numite candidați și sunt considerate compuși de sine stătători pentru a găsi mai multe similitudini. Cristalele compușilor mici (compuși cu 2 atomi) pot fi găsite a fi similare după concatenare (celule primitive), în caz contrar acestea vor fi considerate coincidențe. Fișierele „.cif” prezintă deja acest beneficiu, dar există un dezavantaj: numărul de atomi crește și el, iar timpul de calcul este finit. Astfel de fișiere sunt descărcate din baza de date „The Materials Project” [25–40]. Un avantaj al acestei baze de date este că fiecare fișier are un identificator, care este prezent și în adresa web și poate fi accesat cu ușurință. Un alt mod de identificare -

DOI – disponibil pentru o parte dintre compuși este prezentat în Anexa A. Unii parametri pot fi, de asemenea, preluați din această sursă. Candidații descărcați din sursa sus menționată sunt numiți folosind această sintaxă: compus + identificator (de exemplu: „Ca₂Si 1009733”, sau „candidat 1009733”).

Pentru primul compus au fost luați în considerare 72 de candidați cu scoruri mai mari de 0,85. Unii prezintă exact același grup spațial și ar putea fi tratate ca și coincidențe. Parametrii sunt preluați din baza de date precum „The Materials Project” și din literatură.

II. Generalități

II.1. Sisteme de stocare a energiei

Sistemele de stocare a energiei se află în centrul lumii noastre moderne, portabil într-o gamă largă de dispozitive. Această secțiune oferă o explorare a elementelor fundamentale ale sistemelor de stocare a energiei, inclusiv principii de bază, componente și exemple.

II.1.1. Descoperiri inițiale

Ideile timpurii legate de energia electrică până la dezvoltarea tehnologiilor moderne sunt dovezi ale curiozității umane, explorării științifice și progreselor tehnologice.

Originile pot fi urmărite încă din cele mai vechi timpuri, când oamenii observau fenomene naturale legate de electricitate. Grecii antici, de exemplu, au descoperit că prin frecarea pietrei de succin (numit și chihlimbar, ambră galbenă) pe o blană, acesta poate atrage obiecte ușoare. În mod asemănător, egiptenii antici foloseau peștii electrici pentru a atenua durerea, recunoscând prezența șocurilor electrice [41].

În 1650, Otto von Guericke, un fizician german, a efectuat experimente privind generarea de electricitate. În 1729, conductivitatea electrică a fost descoperită de fizicianul englez Stephen Grey. Ben Franklin și-a efectuat experimentul de zbor cu zmee în 1752 pentru a investiga caracteristicile electricității.

II.1.2. Definiții și principii de bază

Cupluri redox

Reacțiile redox reversibile (oxido-reducere) implică transferul de electroni între specii chimice, permițând stocarea energiei electrice și conversia în energie chimică. Ele pot fi analoge cazului acizilor și bazelor conjugate. De exemplu, în teoria Lewis, un acid este o substanță care acceptă perechi de electroni. Atunci când un agent reducător donează unul sau mai mulți electroni, numărul său de oxidare crește. În acest caz, vorbim de elemente individuale care suferă oxidare sau reducere. Specia rezultată este capabilă să reaccepte electronii și este denumită agent oxidant.

Așa cum ne-am obișnuit pentru acizi și baze, este posibil să se prezică direcția unei reacții redox utilizând semi-ecuații tabelate.

Densitatea de energie se referă la cantitatea de energie care poate fi stocată pe unitate de masă sau volum. Diferența de potențial redox dintre doi compuși dintr-un cuplu redox determină tensiunea sistemului de stocare a energiei.

Metalele multivalente permit mai mult de o etapă de oxidare care poate crește densitatea energetică. Acizii sau bazele poliprotice sunt neutralizate în mod asemănător în mai multe etape de disociere. Un metal binecunoscut folosit cu succes în sistemele de stocare a energiei este vanadiul. În timpul încărcării unui sistem de stocare a energiei în flux redox cu

vanadiu, ionii V(II) de la electrodul pozitiv sunt oxidați la ioni V(III), în timp ce ionii V(V) de la electrodul negativ sunt reduși la ioni V(IV).

Componente

Sistemele de stocare a energiei sunt compuse din una sau mai multe celule electrochimice (pile voltaice), fiecare conținând un anod, un catod și un electrolit. Reacțiile chimice generează un flux de electroni, creând un curent electric care poate fi valorificat în diverse scopuri.

Anodul este electrodul la care are loc oxidarea în timpul descărcării (sau utilizării), iar electronii sunt eliberați în circuitul extern, devenind ioni sau specii încărcate pozitiv. Catodul este electrodul unde are loc reducerea în timpul utilizării; acceptând electroni din circuitul extern și devenind ioni sau specii încărcate negativ.

Electrolitii permit mișcarea ionilor sau a speciilor între anod și catod și transferul de sarcină în timpul funcționării. Asigură continuitatea reacțiilor electrochimice, fluxul de electroni, al sarcinii și completează circuitul electric.

Alegerea materialului electrozilor depinde de chimia specifică. Materialele anodice comune includ zinc, litiu, grafit și plumb. Materialele catodice comune includ dioxid de mangan, oxid de litiu cobalt, compuși de nichel-cadmium și dioxid de plumb.

Electrolitii pot fi lichizi (cum ar fi soluții apoase sau solvenți organici), în stare solidă sau gel. Fiecare tip are avantajele și limitările sale, în funcție de chimia și aplicația lui.

Notația chimică pentru o celulă Zn/Cu este:

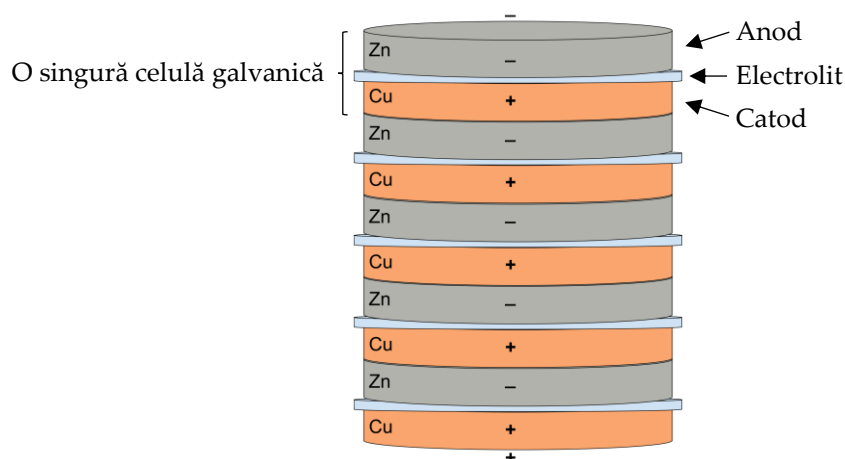


Figura II.1 Exemplu de celule galvanice Zn/Cu în serie.

O semicelulă reprezintă unul dintre cei doi electrozi dintr-un sistem de stocare a energiei (pilă voltaică, celulă galvanică sau baterie simplă). De exemplu, cele două semicelule din sistemul de stocare a energiei Zn/Cu formează un cuplu oxidant-reducător.

O semicelulă este creată prin scufundarea unui fragment de reactant într-o soluție de electrolit. O semicelulă nu poate reacționa până când este legată de o altă semicelulă printr-o punte de sare și un circuit electric extern. În timpul descărcării, electrodul pozitiv este catod, iar electrodul negativ este anod.

Anod (-)	(+) Catod
Reducător \rightarrow Oxidant + ne^-	Oxidant + $ne^- \rightarrow$ Reducător
Zn este agentul reducător.	Cu^{2+} este agentul oxidant.
Zn este oxidat la Zn^{2+} .	Cu^{2+} este redus la Cu.
$Zn \rightarrow Zn^{2+} + 2e^-$	$Cu^{2+} + 2e^- \rightarrow Cu$

Acum Zn^{2+} este agentul de oxidare (cunoscut și ca oxidant, receptor de electroni sau acceptor de electroni), iar Cu este agentul de reducere (reducător sau donor de electroni).

Având un circuit conectat printr-un electrolit și un conductor electric, putem introduce un bec pentru a folosi energia (ca diferență de potențial U). După un timp, echilibrul este atins, diferența de potențial fluctuează aproape de zero și este prea mică pentru a menține becul aprins.

Primele sisteme Zn/Cu au fost sisteme nereîncărcabile – sisteme primare. Odată cu trecerea timpului, apare sistemul secundar care este reîncărcabil [42]. Rolurile se schimbă în timpul reîncărcării, deoarece oxidarea are loc la electrodul pozitiv, pe care acum îl numim anod, iar reducerea are loc la electrodul negativ, pe care acum îl numim catod.

Catod (-)	(+) Anod
Oxidant + $ne^- \rightarrow$ Reducător	Reducător \rightarrow Oxidant + ne^-
Zn^{2+} este agentul oxidant.	Cu este agentul reducător.
Zn^{2+} este redus la Zn.	Cu este oxidat la Cu^{2+} .
$Zn^{2+} + 2e^- \rightarrow Zn$	$Cu \rightarrow Cu^{2+} + 2e^-$

Acum Zn^{2+} este agentul reducător și Cu este agentul oxidant.

Și așa mai departe folosim și reîncărcăm bateria.

Cel mai bun sau cel mai puternic agent de reducere este cel care are cea mai mare rază atomică; are o distanță mai mare între nucleu și electroni. Când electronegativitatea este mai mare și forța de atracție exercitată de atom asupra electronilor este mai mare. Energia de ionizare este definită ca energia necesară pentru îndepărtarea celui mai puțin legat electron (precum un electron de valență) pentru a forma un cation. Dacă electronii sunt mai apropiați de nucleul atomului, energia de ionizare a atomului este mai mare. Agenții reducători sunt acele substanțe cu potențial de reducere mic, datorită afinității lor scăzute la electroni. Sunt donatori de electroni prin natura lor, în mod tipic substanțe care se află la cele mai scăzute niveluri de oxidare și cu o cantitate mare de electroni, de obicei metale sau ioni negativi, printre care acid ascorbic, sulf, hidrogen, fier, litiu, magneziu, mangan, potasiu, sodiu, vitamina C, zinc și chiar extract de morcovi.

Estimarea potențialului celulelor electrochimice este adesea dată ca exemplu studenților, iar un curs prezintă aceste principii într-un alt mod [43,44].

II.1.3. Primele sisteme de stocare a energiei electrice

La sfârșitul anilor 1780, Luigi Galvani, un medic și fizician italian, a făcut o descoperire cunoscută sub numele de „electricitate animală”. Prin experimentele sale cu pulpe de broaște, Galvani a observat că mușchii pulpelor de broaște zvâcnesc atunci când intră în contact cu diferite metale. Această descoperire a pus bazele înțelegerii relației dintre electricitate și organismele vii [45]. Galvani a petrecut ani de zile încercând ipoteza electricității în nervi cu o varietate de metale. S-au provocat contracții musculare fără o sursă de încărcare electrostatică prin atingerea nervului cu metale diferite. Volta a fost printre primii care au răspuns serios la experimentele lui Galvani. Termenul galvanism este folosit pentru a indica orice contracție musculară stimulată de un curent electric. Coroziunea galvanică este o corodare electro-chimică accelerată care apare atunci când două elemente metalice ne-inerte sunt în contact.

Alessandro Giuseppe Antonio Anastasio Volta credea că o interacțiune chimică provoacă electricitate încă din 1794. Adevărata descoperire în tehnologia bateriilor a venit în 1800, când a inventat pila voltaică. A demonstrat că energia electrică poate fi generată chimic și nu doar de ființe vii. Această invenție timpurie a fost compusă din carton înmuiat în apă de mare și un număr de discuri repetate din cupru și zinc. Pila voltaică a fost primul dispozitiv capabil să producă un flux continuu de electricitate, prima descoperire semnificativă în domeniul electro-chimiei. Forța electro-motoare care împinge curentul într-un circuit conținând o singură celulă voltaică, este cauzată de o reacție chimică și nu de diferența de tensiune dintre două metale. O pilă este expusă la Muzeul de Istorie al Universității din Pavia [46]. Volta era idolatrizat de studenții lui, a câștigat chiar și admirația lui Napoleon, dar a preferat să trăiască mai aproape de familie și de biserică. Din cauza numărului foarte mare de studenți ce doreau să participe la cursurile domnului Volta, a fost necesară construirea unui nou teatru pentru fizică, „Aula Volta”. A scris legea capacității electrice și pentru această inovație unitatea pentru potențialul electric îi poartă numele.

În iunie 1814, Volta l-a întâlnit pe Michael Faraday la Milano și i-a oferit o pilă.

Faraday a adus contribuții semnificative la înțelegerea electro-chimiei în anii 1830. A formulat legile electrolizei, care descriu relația dintre cantitatea de reactant consumat în reacția chimică de la un electrod și cantitatea de electricitate care trece prin electrolit. A efectuat experimente cu un inel de ferită, un galvanometru și o baterie; apoi a dezvoltat principiul mobilității ionice în reacțiile chimice ale bateriilor. Legile lui Faraday au oferit o înțelegere fundamentală a proceselor electro-chimice. A considerat că divinitatea și natura i-au oferit în dar succesul, a refuzat de două ori să devină președintele Societății Roiale și unitatea de măsură pentru capacitatea electrică îi poartă numele.

O pilă uscată Clarendon de compoziție incertă este păstrată la Universitatea Oxford. Se numește Clopotul electric de la Oxford (The Oxford Electric Bell). Cu siguranță sună din 1840 și poate că sună din 1825. Se va opri în aproximativ un deceniu [47].

Au apărut mai multe varietăți de baterii precum cele din **Tabelul II.1:**

An	Inventator	Anod	Catod	Electrolit	Îmbunătățiri
1802 [48]	William Cruickshank	Zn	Cu	H ₂ SO ₄	prima baterie inundată; s-a redus rezistența internă.
1803 [49]	* Johann Wilhelm Ritter	Zn	Cu	NaCl	prima celulă uscată, dar nepublicată; tensiune înaltă.
1812 [50]	Giuseppe Zamboni	Zn	Ag	NH ₄ Cl	prima celulă uscată, publicată; sarcină statică având tensiune înaltă.
1814 [51]	William Hyde Wollaston	Zn	Cu	H ₂ SO ₄	coroziune redusă a electrozilor.
1836 [52]	John Frederic Daniell	Zn + ZnSO ₄	Cu + CuSO ₄	H ₂ SO ₄	compartimente separate.
1837 [53]	Golding Bird	Zn + ZnSO ₄	Cu + CuSO ₄	H ₂ SO ₄	ceramică poroasă ce reduce amestecarea celor două soluții.
1838 [54]	Johann Christian Poggendorff	Zn(Hg)	C	H ₂ SO ₄	
1839 [55]	William Robert Grove	Zn	Pt	HNO ₃ + H ₂ SO ₄	pilă (celulă) de combustie inițială ce elimină H ⁺ .
1840 [56]	Alfred Smee	Zn	Ag acoperit cu Pt	H ₂ SO ₄	simplă și ieftină.
1841 [57]	Robert Wilhelm Bunsen	Zn	C	H ₂ SO ₄	C este practic și ieftin.
1842	William Robert Grove	Zn	Pt	HNO ₃	performanță îmbunătățită și polarizare redusă.
1860 [58]	Raymond-Louis Gaston Callaud	Zn + ZnSO ₄	Cu + CuSO ₄	H ₂ SO ₄	ceramică poroasă ce reduce amestecarea celor două soluții și polarizarea.
1866 [59]	Georges Leclanché	Zn	C	NH ₄ Cl	se previne formarea de H ⁺ folosind MnO ₂ pentru a preveni polarizarea.
1866	Georges Leclanché	Zn	C + MnO ₂	NH ₄ Cl	
1868	Jules Grenet	Zn(Hg)	C	ZnSO ₄ + H ₂ SO ₄	
1873	Josiah Latimer Clark	Zn	HgO	ZnSO ₄	folosită ca celulă de referință datorită stabilității și acurateții.

* a descoperit fenomenul prin care se descompun compușii în elemente constitutive folosind electricitatea.

Tabelul II.1 Evoluții înainte de chimia plumb-acid.

II.1.4. Îmbunătățiri semnificative

Reducerea polarizării se referă la minimizarea rezistenței sau obstacolelor la fluxul de electroni în timpul reacțiilor electro-chimice. Polarizarea poate apărea din varii factori, cum ar fi acumularea de produse secundare de reacție, formarea straturilor de pasivare pe electrozi sau difuzia lentă a reactanților [60].

Când are loc polarizarea, aceasta poate duce la o scădere a performanței, inclusiv la o cădere de tensiune redusă. Există mai multe abordări pentru reducerea polarizării:

Optimizarea proiectării electrozilor prin selectarea materialelor adecvate pentru electrozi, creșterea suprafeței acestora și îmbunătățirea conductibilității lor [61].

Alegerea compoziției și concentrației adecvate a electroliților poate facilita mișcarea ionilor între electrozi și poate menține un mediu electrochimic echilibrat [62].

Introducerea catalizatorilor sau aditivilor în sistem poate facilita cinetica reacției electrochimice.

Menținerea unei temperaturi optime de funcționare poate ajuta, de asemenea, la reducerea polarizării. Temperaturile extreme pot crește rezistența și pot împiedica mișcarea ionilor și electronilor, ducând la o polarizare mai mare.

II.1.5. Tipuri de sisteme de stocare a energiei

Sistemele primare se referă la invenții nereîncărcabile care sunt concepute pentru o singură utilizare. Odată ce reacțiile chimice sunt epuizate, sistemul nu mai este funcțional și trebuie înlocuit. Ele utilizează diverse substanțe chimice, inclusiv alcaline, zinc-carbon și litiu. Sunt surse de alimentare autonome și sunt utilizate în mod obișnuit în dispozitive cu cerințe de putere reduse, cum ar fi telecomenzi și electronice de unică folosință. În general, au o densitate de energie mai mare decât cele secundare, dar pilele (celulele) de combustie pot oferi o densitate de energie și mai mare în funcție de combustibilul utilizat.

Sistemele de stocare secundare au avantajul reîncărcării, spre exemplu: bateria acidă cu plumb, litiu-ion, hidrură de nichel-metal (NiMH) și nichel-cadmium (Ni-Cd) [63].

Pilele de combustie generează continuu energie electrică prin reacția electrochimică dintre un combustibil (cum ar fi hidrogenul) și un oxidant (cum ar fi oxigenul). Există mai multe tipuri de pile de combustie, inclusiv cele cu hidrogen, metanol direct (DMFC) și oxid solid (SOFC). Fiecare tip utilizează combustibili diferiți și funcționează la temperaturi diferite. Au aplicații diverse, transportul (pile de combustie pentru vehicule), generarea staționară de energie, surse portabile de energie și chiar explorarea spațiului. Acestea oferă o eficiență energetică ridicată, emisii scăzute și potențial de utilizare a combustibililor regenerabili [64].

II.1.6. Etape determinante

A trecut mai puțin de un secol și se descoperă primul sistem chimic de stocare care a lăsat o amprentă până în zilele noastre.

La mijlocul secolului al XIX-lea, bateria plumb-acid a apărut ca o descoperire majoră. Fizicianul francez Gaston Planté a dezvoltat un design practic în 1859, utilizând un anod pe bază de plumb și un catod cu dioxid de plumb scufundat într-un electrolit de acid sulfuric.

Aproximativ 60% din greutatea unei baterii cu plumb este reprezentată de plumb. Pasta modernă ce înlocuiește electrolitul conține negru de fum, sulfat de bariu și lignosulfonat. Un separator este folosit cu proprietăți mecanice precum permeabilitate, porozitate, distribuția dimensiunii porilor, suprafață specifică, rezistență mecanică, rezistență electrică, conductivitate ionică și compatibilitate cu electrolitul.

Se continuă enumerarea din **Tabelul II.1:**

An	Inventator	Anod	Catod	Electrolit	Îmbunătățiri
1881	Emile Alphonse Faure	Pb	Pb	PbO + H ₂ SO ₄	
1885 [65]	Alfred Dun	C în soluție aproape pură de	Fe în soluție foarte diluată de	apă regală	
1886 [66]	Carl Gassner	Zn	C	NH ₄ Cl + ghips + ZnCl ₂	celulă uscată ce permite un sistem mai portabil și mai versatil.
1899 [67]	Waldemar Jungner	Cd	Ni(OH) ₂	KOH	densitate de energie mărită și viață mai lungă.
1899	Waldemar Jungner	Fe	NiO(OH)	KOH	rezistentă la supra-încărcare și la încălzire excesivă.
1901	Thomas Edison	Fe + C	NiO	KOH	
1901	Thomas Edison	FeO	NiO(OH)	KOH	
1903 [68]	Thomas Edison	Fe	NiO(OH)	KOH	
1904 [69]	Thomas Edison și François Lalande	Fe	CuO	KOH	
1912 [70]	Gilbert N. Lewis și M. S. Whittingham	Li	S	LiClO ₄ + (MeO) ₂ CO	
1932 [71]	Thomas Midgley Jr.	Hg amalgam	HgO	HgSO ₄ + H ₂ SO ₄	temperaturi înalte.
1932 [72]	George W. Heise and Thomas Edison	Zn	AgO	KOH	densitate de energie mărită pentru industria aero-spațială.
1942	Samuel Ruben și Philip Mallory	Zn	HgO	KOH	tensiune stabilă.
1949 [73]	Lewis Urry	Zn	MnO ₂	KOH	performanță mărită la cureți mari.
1967 [74]	echipa lui Stanford Robert Ovshinsky	La Ce Nd Ni Al Co	NiO(OH)	KOH	NiMH reduce impactul asupra mediului.

Tabelul II.2. De la Pb la Li.

În anii 1970, Stanley Whittingham, John Goodenough și Akira Yoshino au contribuit la dezvoltarea chimiei litiu-ion reîncărcabile, iar creșterea pe care a cunoscut-o această industrie de atunci a dus la multitudinea de materiale studiate care fac obiectul acestei cărți.

II.1.7. Tendințe și perspective emergente

Multifuncționalitate: stocarea în straturi de vopsea, elemente flexibile, extensibile și cu auto-încărcare sunt câteva exemple de sistem care încearcă să ocupe un spațiu pe care nu îl folosim în viața noastră. Se explorează tehnologii care pot îndeplini și funcții de detectare, de acționare sau de auto-vindecare [75].

Super-condensatori: cunoscuți și sub denumirea de ultra-condensatori, aceștia stochează energie prin adsorbția electrostatică a ionilor la interfața electrod-electrolit. Dispunearea geometrică a materialelor electrozilor joacă un rol crucial în determinarea suprafeței specifice disponibile pentru adsorbția ionilor. Materialele cu o suprafață mare, cum ar fi cărbu-

nele activ sau grafenul, oferă mai multe situri pentru adsorbția ionilor, crescând capacitatea de stocare [76].

Recent, RFB-urile organice apoase (AORFB) și RFB-urile organice non-apoase (NAORFB) au primit o atenție din ce în ce mai mare ca alternative viabile [77].

Reciclare și durabilitate. Pe măsură ce cererea de sisteme de stocare continuă să crească, se pune accent pe dezvoltarea de tehnologii durabile și ecologice: eforturi de îmbunătățire a proceselor de reciclare, de reducere a utilizării de materiale rare și toxice și de promovare a practicilor de economie circulară în industrie. Deși mediul este foarte important pentru noi, unele implicații vor fi doar menționate întrucât subiectul nu aderă la sfera acestei cărți: Materii Prime, Consum de energie, Durată de viață, Managementul sfârșitului de viață, Materiale toxice, Deșeuri periculoase, Politică și Regulamente.

Chimia computațională evită risipa de resurse, deoarece sunt evitate experimente costisitoare. Este imposibil din punct de vedere fizic să încerci toate combinațiile de materiale într-un timp acceptabil dat [78].

II.2. Modelare computațională

Metodele experimentale tradiționale pentru descoperirea și optimizarea materialelor pot fi consumatoare de timp, bani și de resurse. Metodele de calcul oferă o abordare mai eficientă și mai rentabilă, permițând analizarea unui număr mare de materiale potențiale înainte de a efectua experimente fizice. S-au depus unele eforturi în diferite tehnici de modelare computațională [79–84].

Metodele de calcul permit proiectarea și optimizarea materialelor cu proprietăți specifice și caracteristici performante. Prin simulări și modelări, se pot prezice comportamentul materialelor la nivel atomic și molecular, pot înțelege proprietățile electrochimice și restrânge numărul de candidați promițători pentru investigații ulterioare.

Se pot simula și analiza mișcarea ionilor, electronilor și defectelor din materiale, ajutând la înțelegerea mecanismelor care guvernează performanța și degradarea.

Se pot prezice diferite proprietăți ale materialelor relevante, cum ar fi tensiunea, capacitatea, stabilitatea și coeficienții de difuzie.

Modelarea computațională permite vizualizarea și analiza structurilor geometrice complexe din sistemele de stocare a energiei. Tehnicile avansate de vizualizare, cum ar fi redarea tridimensională și realitatea virtuală, permit explorarea și înțelegerea detaliilor complexe ale aranjamentelor geometrice. Această înțelegere vizuală ajută la identificarea modelelor, relațiilor dintre similitudinile geometrice și proprietățile electrochimice.

Dinamica moleculară (MD) este o metodă de calcul utilizată pentru studierea mișcării fizice a atomilor și moleculelor. Aceste specii chimice interacționează pentru o perioadă fixă de timp, ceea ce oferă o viziune asupra evoluției dinamice a sistemului. Simulările de dinamică moleculară pot fi folosite pentru a investiga aranjamentul geometric al atomilor și moleculelor din materialele de stocare a energiei. Simulând comportamentul atomilor și mo-

leculelor în timp, se pot oferi informații despre stabilitatea structurală, căile de difuzie și proprietățile de interfață ale materialelor. Aceste informații ajută la înțelegerea modului în care similitudinile prezic performanța și comportamentul sistemelor de stocare a energiei.

Teoria funcționalului densității (DFT) este o metodă fundamentală în chimia computațională, utilizată pentru a investiga structura electronică a atomilor, moleculelor și solidelor. Această abordare se bazează pe principiul că informațiile despre energia unui sistem pot fi obținute din funcția de densitate a electronilor, care reprezintă densitatea de probabilitate a găsirii unui electron într-un anumit volum de spațiu.

Calcululele DFT sunt utilizate pe scară largă pentru a studia structura electronică și proprietățile materialelor. Se pot analiza aranjamentul geometric al atomilor și calcula diferite proprietăți, cum ar fi structurile de bandă, densitățile de sarcină și potențialele redox. Aceste informații ajută la înțelegerea modului în care similitudinile influențează proprietățile electronice și mecanismele de transfer de sarcină.

Tehnicile de modelare computațională, cum ar fi algoritmi de optimizare moleculară și simulările Monte Carlo, pot fi utilizate pentru a optimiza aranjarea geometrică a materialelor. Prin ajustarea iterativă a pozițiilor și orientărilor atomilor sau moleculelor, se pot găsi cele mai favorabile configurații care maximizează proprietăți specifice, cum ar fi suprafața, porozitatea sau interacțiunile la interfațe. Acest proces de optimizare ajută la adaptarea caracteristicilor geometrice ale materialelor.

II.2.1. Corelații Structură-Proprietăți

Relațiile structură-proprietate (SPR) se referă la conexiunile dintre caracteristicile structurale ale unui material sau sistem și proprietățile sau comportamentul său.

În contextul sistemelor de stocare a energiei, înțelegerea acestor relații este crucială pentru proiectarea și optimizarea materialelor și dispozitivelor cu performanța dorită. Redăm în cele ce urmează câteva exemple de relații structură-proprietate în sistemele de stocare a energiei.

Structura cristalină a materialelor electrozilor sau a catalizatorilor din pilele de combustie poate avea un impact semnificativ asupra performanței lor electrochimice. De exemplu, în chimia litiu-ion, structura cristalină a materialului catodic, cum ar fi LiCoO_2 , afectează capacitatea sa specifică, stabilitatea ciclică, capacitatea specifică și viteza de încărcare/descărcare. De asemenea, în pilele de combustie, structura cristalină a catalizatorilor, cum ar fi nanoparticulele de platină, influențează activitatea lor catalitică și eficiența în reacțiile de reducere a oxigenului sau de oxidare a hidrogenului [85].

Morfologia și suprafața materialelor joacă un rol crucial în sistemele de stocare a energiei. De exemplu, în super-condensatoare, materialele cu o suprafață mare, cum ar fi cărbunele activat sau grafenul, oferă situri active mai multe pentru stocarea sarcinii, ceea ce duce la o capacitate mai mare. În mod similar, în chimiile cu ioni de litiu, materialele electrozilor cu nanostructuri și suprafață mare pot îmbunătăți difuzia ionilor de litiu [86].

Porozitatea materialelor din sistemele de stocare a energiei afectează transportul ionilor sau moleculelor. Materialele poroase cu structuri bine definite pot facilita difuzia ionilor, sporind viteza de încărcare/descărcare. În pilele de combustie, porozitatea materialelor electrozilor poate afecta accesibilitatea reactanților la suprafața catalizatorului, influențând cinetica de reacție [87].

Structura și proprietățile interfețelor dintre diferite materiale sau faze dintr-un sistem de stocare a energiei pot afecta stabilitatea și performanța acestuia. În chimia litiu-ion, interfaza solid-electrolit (SEI) formată la interfața electrod-electrolit joacă un rol crucial în stabilitate și ciclabilitate. Structura și compoziția stratului SEI pot afecta transportul ionic și transferul de sarcină [88].

Siturile libere și impuritățile din structurile cristaline ale materialelor pot influența proprietățile lor de transport de sarcină. În sistemele de stocare a energiei, defectele pot afecta difuzia ionilor sau electronilor, ducând la modificări ale conductibilității, capacității sau cineticii reacției.

Polinoamele sunt legate de SPR prin aplicarea matematicii combinatorice pentru a enumera și caracteriza diversele configurații moleculare și proprietățile asociate acestora. Polinoamele oferă un cadru sistematic pentru analiza motivelor structurale, similitudinilor și impactul lor asupra proprietăților rezultate ale sistemelor chimice. Prin valorificarea polinoamelor, se pot obține informații despre relațiile dintre structurile moleculare și proprietățile lor, contribuind la înțelegerea relațiilor structură-proprietate în chimie.

În contextul echilibrelor redox, de exemplu, polinoamele pot fi utilizate pentru a analiza aranjamentele geometrice ale compușilor, distribuția căilor de transfer de electroni și proprietățile electrochimice rezultate. Această abordare permite enumerarea și caracterizarea sistematică a configurațiilor moleculare, oferind o bază cantitativă pentru înțelegerea relațiilor dintre motivele structurale și comportamentul redox.

Integrând polinoamele în explorarea relațiilor structură-proprietate, se poate obține o înțelegere mai profundă a modului în care aranjamentele geometrice ale moleculelor influențează proprietățile electronice, reactivitatea și comportamentul.

În general, aplicarea polinoamelor în chimie oferă o perspectivă unică asupra relațiilor structură-proprietate și o abordare cantitativă și sistematică pentru a analiza interacțiunea dintre structurile moleculare și proprietățile lor. Această abordare este promițătoare pentru dezlegarea conexiunilor complexe dintre geometrie, structura electronică și proprietățile materialelor, contribuind în cele din urmă la progresul proiectării materialelor, catalizei și dezvoltării raționale a sistemelor moleculare.

După cum bine a spus Diudea, un singur număr, reprezentând o structură chimică în termeni graf-teoretici, se numește index topologic (TI) [89]. Un index topologic este un număr real legat de un graf molecular [90]. Multe nanomateriale, medicamente și materiale cristaline apar în diverse industrii. Comportamentul medical poate fi studiat cu TI, conducând la înțelegerea relațiilor cantitative dintre structură și proprietăți (QSPR) și a relațiilor cantitative din-

tre structură și activitate (QSAR) [91,92]. Primele TI, chiar înainte de introducerea termenului, sunt cele ale lui Calingaert și Hladky în 1936 [93], Kurtz și Lipkin în 1941 [94], și a lui Wiener în 1947 [95]. Indecșii topologici bazați pe grade sunt cei mai studiați [96].

Unele dintre primele nume care vorbesc despre grafiurile chimice sunt enumerate de Rouvray [97]: Newton, Macquer, Boscovich, Lomonosov, Cullen și Higgins. În 1808, Dalton și Wollaston au introdus modelele de bile și bastoane folosite în sălile de clasă [98,99]. Unul dintre primii chimiști care a încercat o predicție a proprietăților a fost Koop în 1844 [100]. Pornind drumul în conceptul de valență, Couper a desenat prima legătură între atomi în 1858, iar Frankland a avut prima idee despre valențe în 1864. Prima încercare a lui Kekulé de a descrie carbonul tetraedric a urmat în 1867 [97]. Cayley, în 1874 [101,102], și Sylvester, în 1875 [103], au desenat primele grafuri chimice. Werner a studiat chimia complexă în 1893 [97]. În anii 1930 au fost sintetizate multe molecule noi. Grafurile chimice au devenit mai mult o necesitate pentru a diferenția acest număr relativ mare de molecule noi. În 1937, Polya a încorporat conceptele de clase de simetrie, grupe de permutare și funcții generatoare în teorema sa de enumerare [104], continuând o lucrare anterioară a lui Cayley [102].

Revenind la TI, s-au studiat doi indecși inițiali: F de către Platt în 1947 [105,106] și N_2 de către Scantlebury în 1964 [107], înainte ca Hosoya să arate că W este jumătatea sumei tuturor intrărilor din [Di] și să propună indexul Z în 1971 [108], pe care l-a atribuit pentru prima dată lui Wiener. În 1975 a urmat indexul Zagreb [109], care poate fi raportat la Platt și Gordon–Scantlebury prin: $F=2N_2=M_1-e$. Balaban a urmat cu indexul său Centric în 1979 [110]. Danail Bonchev, Ovanes Mekenyan și Milan Randić au propus o generalizare a conceptului de centru al grafului la grafurile ciclice în 1980 [111–113]. O modalitate de clasificare a TI-urilor este gradul de degenerare, de aceea amintim un altul de primă generație, propus de Schultz în 1989 [114,115]. Începutul celei de-a doua generații este marcat de indexul de conectivitate moleculară al lui Randić în 1975 [116], care s-a caracterizat printr-o degenerare foarte scăzută. Se pot numi alți câțiva: indecșii de conectivitate moleculară de ordin înalt studiați de Kier și Hall în 1975 [117–120]; indecșii informațional-teoretici ai lui Bonchev și Trinajstić în 1977 [121]; indecșii Merrifield și Simmons care au fost studiați în 1980 [122–124]; într-un efort de a reduce degenerarea, Mekenyan și Trinajstić au propus super-indexul de informații topologice în 1981 [125]; în 1982, Balaban a modificat formula Randić și a dat naștere indexului mediu de conectivitate bazat pe distanță [126]; indecșii informațional-teoretici ai lui Basak și colaboratorii în 1983 [127]; indexul de informații orbitale pentru conexiunile grafurilor lui Bertz în 1988 [128]; sau indecșii de stare electro-topologici ai lui Kier și Hall în 1990 [129,130]. O contribuție la ideea utilizării valorilor proprii ca TI a fost propusă de Lovasz și Pelikan în 1973 [131].

Se poate considera că începe a treia generație de TI în momentul definirii invariabilelor de vârfuri (atomi) definite local cu număr real (LOVI) [132], așa cum sunt detaliați de Devillers și Balaban într-un capitol de carte [133]. Gutman a rezumat principalele proprietăți ale descriptorilor de structură bazați pe grafuri moleculare și a oferit un studiu comparativ

critic [134]. De atunci s-au dezvoltat câțiva indecși: un tip de index Zagreb bazat pe grade de vecini ai vârfurilor [135]; un index de conectivitate atom-legătură excentric [136]; un index Sanskruti $S(G)$, care arată o corelație bună cu entropia unui izomer al octanului [137]; indexul multiplicativ de conectivitate atom-legătură [138]; indexul de salt al conectivității produsului [139]; M_N ca index de vecinătate Zagreb al grafurilor de produs [140]; și așa mai departe. Mulți autori au calculat indexuri pentru diferite aplicații [141–143], sau expresii analitice pentru astfel de indexuri [144–148]. Un număr de TI se bazează pe coeficienți ai polinoamelor și pot fi derivate direct sau folosind integrale sau derivate [142,149].

II.2.2. Similitudini

Un exemplu de similitudine este observat în oxizii de metale tranziționale utilizați pentru electrozi ai bateriilor litiu-ion. Aceste materiale adoptă adesea o structură cristalină stratificată, cu ioni de metal de tranziție dispuși într-un model specific. Aranjamentul geometric al acestor ioni influențează căile de difuzie pentru ionii de litiu în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare, stabilitatea ciclului și capacitatea [150].

Un alt exemplu se găsește în moleculele organice active redox utilizate în sistemele de stocare a energiei în flux. Aceste molecule posedă adesea un cadru molecular specific, cum ar fi chinone sau viologeni, care permite reacții redox reversibile. Aranjamentul geometric al grupărilor funcționale ale acestora poate influența solubilitatea, stabilitatea și potențialele redox, influențând în cele din urmă eficiența și performanța [151].

În chimia litiu-ion, aranjarea geometrică a materialelor electrozilor poate avea un impact asupra căilor de difuzie pentru ionii de litiu în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare. Materialele cu o structură cristalină stratificată, cum ar fi LiCoO_2 sau $\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_{1-x-y}\text{O}_2$ (Li-NMC), oferă căi pentru transportul eficient al ionilor de litiu [152].

Chimia litiu-sulf este o alternativă promițătoare la cea tradițională datorită densității sale teoretice ridicate de energie. Aranjamentul geometric al sulfului și litiului în electrozi poate influența utilizarea sulfului sau difuzia litiului [153].

Chimia sodiu-ion prezintă, de asemenea, similitudini geometrice în posibilele materiale pentru electrozi. Compuși precum NaMnO_2 sau $\text{NaNi}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_2$ adoptă structuri stratificate, permițând intercalarea reversibilă a ionilor de sodiu în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare [154].

Chimie în stare solidă: aranjamentul geometric al materialului electrolitului solid poate afecta conductivitatea ionică a acestuia. Materialele cu structură cristalină, precum zirconatul de litiu lantan (LLZO, $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$) sau electroliții pe bază de sulfură, oferă căi pentru transportul eficient al ionilor, îmbunătățind performanța și siguranța [155].

VRFB-urile (bateriile cu vanadiu în flux redox) folosesc ioni de vanadiu în diferite stări de oxidare pentru a stoca și elibera energie. Dispunerea geometrică a ionilor în electroliți poate avea un impact asupra eficienței, capacității și pierderilor de energie. Se poate optimiza configurația geometrică a canalelor de curgere ale electrolitului [156].

Sistemele organice în flux redox utilizează molecule organice active redox ca specii active în electrolit. Aranjarea geometrică a grupărilor funcționale în cadrul acestor molecule poate influența solubilitatea, stabilitatea și potențialele redox.

Condensatorii cu ioni de sodiu combină densitatea mare de putere a super-condensatorilor cu densitatea de energie a designului cu ioni de sodiu. Aranjamentul geometric al materialelor de intercalare cu ioni de sodiu, cum ar fi carbonul dur sau oxizii metalelor de tranziție, poate afecta capacitatea, viteza și stabilitatea ciclică [157].

Chimia metal-halogenură, proiectată cu iodură de sodiu, zinc-brom sau zinc-clor utilizează ionii metalici și ionii de halogenură din electrolit pentru a stoca și elibera energie. Aranjamentul geometric al ionilor de metal și halogenură poate afecta solubilitatea sau reacțiile redox [158].

Chimia litium-oxigen / Li-O₂ / litium-aer are potențial pentru o densitate mare de energie. Aranjamentul geometric al electrozilor de oxigen și litium poate afecta difuzia oxigenului sau cinetica reacției [159].

Anozii de grafit în chimia cu litium-ion. Structura sa stratificată permite intercalarea ionilor de litium în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare. Materialele de grafit similare din punct de vedere structural, cum ar fi grafitul natural, grafitul sintetic sau grafenul, pot avea capacități specifice, viteză de încărcare sau o stabilitate de ciclu asemănătoare [160].

Catozii de perovskit în pilele de combustie cu oxid solid. Structurile perovskite au o formulă generală de ABO₃, unde A și B sunt cationi metalici. Materialele perovskite similare din punct de vedere structural, cum ar fi manganitul de stronțiu lantan (LSM), cobaltita de stronțiu lantan (LSC) sau ferita de stronțiu lantan (LSF), pot prezenta o cinetică asemănătoare pentru reacția de reducere a oxigenului sau conductivitate ionică [161].

Rețelele sau structurile metalo-organice (MOF) sunt materiale poroase compuse din ioni metalici sau clustere coordonate cu liganzi organici. MOF-urile au o structură foarte ordonată, cu o suprafață mare, ceea ce le face potrivite pentru aplicații în stocarea gazului, cataliză și stocarea energiei. MOF asemănătoare structural pot prezenta porozitate, suprafață sau capacități de adsorbție a gazului similare [162].

Structuri la scară nano-metrică în super-condensatori: nano-tuburi de carbon sau grafen sunt folosite ca materiale pentru electrozi. Astfel de nano-materiale asemănătoare structural pot avea o suprafață asemănătoare, conductivitate electrică sau cinetică de difuzie ionică, care au un impact direct asupra capacității de stocare [163].

Disponerea geometrică a materialelor electrozilor din baterii poate influența mecanismele de transfer de electroni în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare (De exemplu, în chimii litium-ion materiale cu o structură cristalină stratificată, cum ar fi oxidul de litium cobalt (LiCoO₂) sau oxidul de litium nichel mangan cobalt (NMC)). Disponerea geometrică a acestor materiale permite intercalarea și de-intercalarea ușoară a ionilor de litium, facilitând transferul de electroni între electrozi [164].

Configurația geometrică a catalizatorilor din pilele de combustie poate afecta mecanismele de transfer de electroni în timpul reacției de reducere a oxigenului (ORR) și a reacției de evoluție a oxigenului (OER). Catalizatorii cu o suprafață mare și o structură geometrică bine definită, cum ar fi nanoparticulele de platină depuse pe carbon, oferă situri active pentru ORR și OER. Aranjamentul geometric al acestor catalizatori poate îmbunătăți cinetica transferului de electroni [165].

În super-condensatori, structura geometrică a electrolitului poate afecta mecanismele de transfer de electroni la interfața electrod-electrolit. De exemplu, electrozii carbon nanoporoși au o suprafață mare și o structură a porilor bine definită. Acest lucru facilitează adsorbția și desorbția ionilor, permițând transferul eficient de electroni și îmbunătățind capacitatea super-condensatorului [166].

Aranjamentele geometrice ale moleculelor redox-active din electrolit pot afecta mecanismele de transfer de electroni în timpul ciclurilor de încărcare și descărcare. Aranjarea grupărilor funcționale în cadrul acestor molecule poate influența potențialele lor redox și cinetica transferului de electroni. Prin optimizarea configurației geometrice a moleculelor active redox, se poate îmbunătăți eficiența transferului de electroni [167].

Suprafața geometrică a electrozilor din sistemele de stocare a energiei, cum ar fi bateriile și super-condensatorii, influențează direct capacitatea acestora. Creșterea suprafeței prin utilizarea materialelor nano-structurate sau poroase îmbunătățește siturile active electrochimic pentru stocarea sarcinii [168].

Similitudinile geometrice în aranjarea speciilor active redox, cum ar fi ionii metalelor de tranziție sau a moleculele organice pot afecta cinetica reacțiilor redox în sistemele de stocare a energiei. Configurația geometrică a acestor specii influențează accesibilitatea acestora, proximitatea și interacțiunea lor cu electrolitul, afectând vitezele de reacție [169].

Disponerea geometrică a materialelor poate influența, de asemenea, stabilitatea și ciclabilitatea sistemelor de stocare a energiei. În chimia ionului de litiu, structura geometrică a electrodului poate afecta stabilitatea stratului de interfață solid-electrolit (SEI), care se formează pe suprafața electrodului și are un impact asupra performanței pe termen lung și a ciclului de viață [170].

La interfața electrod-electrolit, aranjarea geometrică a materialelor poate afecta rezistența la transferul de sarcină în sistemele de stocare a energiei. O interfață geometrică bine proiectată, cu contact și zonă de interfață optimizate reduce rezistența la transferul de sarcină, îmbunătățind eficiența generală și performanța sistemului [85].

Diferența de potențial dintre anod și catod, determinată de reacțiile redox, este exprimată în tensiune (unitate de măsură - volt V). Capacitatea se referă la cantitatea de energie electrică pe care o poate stoca sistemul și este de obicei măsurată în amper-oră (Ah) sau miliamper-oră (mAh). Densitatea de energie este o măsură a cantității de energie pe care un sistem o poate stoca pe unitate de volum sau greutate. Densitatea de putere se referă la viteza de furnizare a energiei electrice și este importantă pentru aplicațiile de putere mare.

III. Metode - Polinoame în chimie ^{1,2}

În ultimii ani, domeniile chimiei, matematicii și ingineriei au înregistrat progrese semnificative în dezvoltarea de metode și algoritmi pentru rezolvarea unor probleme complexe. Vom explora descriptorii moleculari sau algoritmi pentru compararea și alinierea structurilor moleculare. Aceste articole aprofundează în complexitatea subiectelor respective, oferind perspective asupra cercetării și dezvoltărilor în aceste domenii. Subliniem semnificația polinoamelor graf-teoretice în chimia teoretică, intersecția lor cu matematica pură și natura interdisciplinară. Discutăm diferite tehnici, cum ar fi de rotație invariante, abordări bazate pe fragmente și algoritmi de programare dinamică, care vizează identificarea regiunilor de similitudine și realizarea alinierii structurale rapide și precise a moleculelor.

Haruo Hosoya a introdus mai întâi un polinom de numărare, polinomul Hosoya (HP), pentru a caracteriza un graf [108,173]. Matricele de numărare sunt formele extinse ale polinoamelor de numărare [174], deoarece unele proprietăți legate de distanță pot fi exprimate în forma polinomială cu coeficienți calculați din matrice [175,176].

Polinoamelor de numărare (count-polis) sunt foarte utile pentru discriminarea între structuri similare [177]. Un polinom este un tratament mai general decât un index însă. Avantajul polinoamelor este reducerea degenerării deoarece este invariant raportat la numerotarea atomilor [177,178]. Degenerarea se referă la valori egale pentru molecule diferite: greutatea moleculară are degenerare mare deoarece există multe molecule cu aceeași greutate; Descriptorii 3D arată o degenerare scăzută sau deloc, deoarece două molecule cu aceeași greutate își pot avea atomii aranjați diferit în spațiul 3D. S-au obținut formule pentru entropiile și energiile polinoamelor de numărare ale unor structuri repetate [179].

Având în vedere acest lucru, polinoamele de numărare sunt descriptorii moleculari. Ei ar trebui să fie invariante la toate operațiunile legate de manipularea moleculei care nu afectează structura moleculară. Numărul acestora a crescut pentru a ține pasul cu bazele de date mari, precum CAS, așa că ar trebui căutate unele calități atunci când se aleg descriptorii. Aceștia ar trebui să fie: invariante față de etichetarea și numerotarea atomilor; invariante la roto-translația moleculei; să aibă un algoritm neambiguu. Să aibă o interpretare structurală directă; și să fie definiți local [149,180]. Mai mult, ei sunt de preferință: teoretici și nu bazați pe proprietăți experimentale; nu sunt legați trivial de alți descriptorii; generalizabili la descriptorii „superiori”; eficienți de construit; aplicabili pentru o clasă largă de molecule; interpretativi prin structură; să utilizeze concepte structurale familiare; să se schimbe treptat cu schimbarea treptată a structurilor; să aibă o dependență corectă față de dimensiune, dacă este legată de dimensiunea moleculei; să posede o relație puternică cu cel puțin un atribut și, în mod ideal, să facă distincție între izomeri.

¹ Joița, D.-M.; Tomescu, M. A.; Jäntschi, L. [171].

² Joița, D.-M.; Jäntschi, L. [172].

Coeficienții polinoamelor și zerourile lor sunt de interes în chimie [181]. Zerourile sunt notate cu „ λ ” sau „ x ” și sunt aceleași cu rădăcinile (valori caracteristice, rădăcini caracteristice, rădăcini latente, valori proprii, valori proprii sau valori spectrale) [182]. Deoarece multe dintre polinoamele discutate sunt derivate din matrici, matricea însoțitoare este deja definită. Cu alte cuvinte: să spunem că avem un polinom inițial P_i , avem nevoie de o matrice al cărei polinom caracteristic (ChP discutat în acest text) este același cu P_i ; pe baza definiției, rădăcinile acestui polinom sunt identice cu valorile proprii. Dacă cineva încearcă să descrie topologia unei molecule, se pot stoca informații despre adiacențele (legăturile) dintre atomi, precum și despre identități (atomii). Simplificând prin ignorarea tipurilor de legături și atom, matricea de adiacență ($[Ad]$) o matrice cu elementele $b_{i,j} = 1$ dacă o muchie leagă vârfurile i și j și $b_{i,j} = 0$ în caz contrar) și matricea de identitate ($[Id]$) conțin doar zerouri și unu. Orice astfel de matrice pătrată sau derivată ($[Tm]$) poate fi utilizată pentru a construi un polinom de numărare care poartă caracteristicile moleculei originare:

$$CoP \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k \geq 0} n \cdot x^k, \quad (1)$$

unde „ k ” este orice valoare în $[Tm]$, „ n ” numără aparițiile lui „ k ”, $n = \text{count}([Tm]_{i,j} = k)$, iar „ x ” reprezintă rădăcinile polinomului [177,183]. De exemplu, fie:

$$[Tm] = [Id] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Deoarece „1” și „0” apar de două ori:

$$CoP_{[Id]} = 2x^1 + 2x^0$$

Se propune o procedură care să generalizeze cumva utilizarea polinoamelor în analiza regresiei [178]. Ea este folosită pentru crearea și utilizarea unei formule polinomiale care corelează structura cu proprietatea dată prin valoarea polinoamelor la un moment dat.

Aplicațiile pentru calcularea polinoamelor se pot baza pe fișiere care conțin date moleculare, cum ar fi unele gateway-uri de software [184]. Acestea sunt mai greu de întreținut, deoarece există multe extensii de fișiere și programe care nu exportă fișiere identice pentru același compus chimic. De asemenea, utilizatorii ar trebui să-și trimită contribuțiile dacă remediază erori, astfel încât autorul inițial să poată implementa aceste îmbunătățiri. Căutarea pe Internet poate dezvălui modalități de a calcula polinoame, dar scripturile trebuie să fie capabile să țină cont de matematica simbolică [185–187].

Rouvray [188,189] a atras atenția comunității științifice în 1971 că studiile interdisciplinare sunt indispensabile pentru promovarea QSAR și QSPR. Astăzi, ne putem uita înapoi la ziua în care am observat că studiile experimentale sunt prea lente pentru a ne baza pentru descoperirea compușilor. Acum computerele sunt prea lente și trebuie să folosească cumva avantajele minții umane pentru a face un pas mai mare în predicție. Recent au fost inițiate eforturi pentru a depăși această problemă, dar nu știm dacă abordările sunt fructuoase [190,191]. Învățarea automată face câțiva pași în acest domeniu, deoarece programăm computerele pentru a învăța modele despre care credem că vor duce la descoperiri științifice importante [192–194]. Este adevărat că mințile tinere preferă să vadă rezultate rapide și ușoare

înainte de a înțelege miezul matematicii complicate din spatele programelor și aceasta va fi miza pentru ei. Să depună efort pentru dezavantajele în fața IA.

Ar putea fi mai ușor de înțeles aceste concepte dacă ar exista o modalitate de a le unifica. O încercare de unificare a fost cea a arborilor Gutman, după cum a subliniat El-Basil [195]; se aplică unor cazuri foarte particulare și nu poate fi pur și simplu extinsă. Apreciem modul în care aceste concepte ajută la înțelegerea similitudinilor dintre polinoame.

Un alt exemplu, poate mai reușit, este imanantul, despre care se discută mai departe. Se prezintă câteva polinoame graf-teoretice în care se îmbină chimia teoretică și matematica pură. Se expun diferențele, similitudinile lor, se raportează la cercetări recente și sugerează altele potențiale. Înțelegerea originilor regularităților pentru clase specifice de compuși poate fi astfel făcută mai ușoară [196].

III.1. Polinomul Caracteristic

Fiind cel mai studiat polinom în teoria chimică a grafurilor, acesta se găsește și în literatură prin termenii *funcție seculară* sau *polinom determinant* și este notat în mod obișnuit cu ϕ sau ChP . Nu este un polinom de numărare în realitate, dar apare ca primul în prezentul text pentru că se dovedește de neînlocuit pentru cercetarea prezentă.

În urma descoperirii tratamentului pe bază de unde (ondulatoriu) la nivel microscopic, acesta a fost folosit pentru prima dată în relație cu o structură chimică. Alte utilizări pot fi exemplificate: teoria topologică a aromaticității, teoria structură-rezonanță, chimia cuantică, numărarea traseelor/drumurilor aleatoare, precum și subiectul acestei lucrări, probleme valoare proprie-vector propriu [197].

ChP este construcția naturală a unui polinom (în x) în care valorile proprii ale lui $[Ad]$ sunt rădăcinile ChP , după cum urmează:

x este o valoare proprie a $[Ad] \rightarrow$ există un vector propriu $[v] \neq 0$ astfel încât $x \cdot [v] = [Ad] \times [v]$.

În consecință $(x \cdot [Id] - [Ad]) \cdot [v] = 0$.

Deoarece $[v] \neq 0 \Rightarrow x \cdot [Id] - [Ad]$ este singular; $\Rightarrow |x \cdot [Id] - [Ad]| = 0$.

ChP este un polinom (în x) de grad a , unde a este numărul de atomi. ChP își găsește utilizări în teoria topologică a aromaticității [198,199], teoria structură-rezonanță [200], chimia cuantică [201] și numărarea mersurilor aleatoare [202], precum și în probleme de vector propriu-valoare proprie [203].

Definiția sa clasică este simplă:

$$ChP = \det(x \cdot [Id] - [Ad]) = |x \cdot [Id] - [Ad]| \quad (1.1)$$

Liu și Zang au descoperit că ChP caracterizează căi și chiar cicluri. Acestea nu pot fi caracterizate prin polinomul permanent [204].

Rădăcinile ChP sunt obținute prin diagonalizarea matricei de adiacență [181]. Suma puterilor w ale acestor rădăcini este egală cu cel de-al w -lea moment spectral al unui graf. Coeficienții ChP pot fi deduși din momentele spectrale și invers [149].

Ghosh a dezvoltat formule pentru a calcula rapid și eficient coeficienții ChP pentru moleculele reprezentate de trei clase de grafuri. Mai târziu, au folosit ChP și pătratul grafului pentru a obține spectre analitice proprii pentru grafuri ale lanțurilor și ciclurilor liniare cu greutateți alternante la margine. Aceste metode pot fi aplicate tuturor grafurilor care au celule unitare care se repeta de-a lungul moleculei [205,206].

Mondal și Mandal au făcut unele progrese în obținerea vectorilor de concentrație ai rețelelor de reacție prin găsirea unei expresii analitice a ChP . Ei găsesc relațiile de recurență între coeficienții săi. Mai târziu, au descoperit că suma coeficienților pentru grafurile de ciclopara-fenilenă (CPP) modelează proprietăți fizice, cum ar fi energia de deformare și diametrul CPP-urilor [207,208].

Gutman a postulat o relație care este valabilă pentru arbori între ChP și indexul Hosoya Z [209]. Mai târziu, Cash l-a extins la grafuri (poli)ciclice, înlocuind polinomul de potrivire cu ChP [210].

ChP este legat de polinomul laplacion, despre care se discută mai târziu [197]. Au fost propuse și alte modificări ale ChP , cum ar fi polinomul μ și polinomul β [149].

Deoarece ChP este legat de polinomul Hosoya, trebuie să fie, de asemenea, legat de polinomul de potrivire (MP) — ambele sunt definite prin numărarea muchiilor independente [197]. Printre multitudinea de alte rezultate cunoscute, unele sunt menționate de Diudea și descoperă alte paralele profunde între polinoamele caracteristice și cele de potrivire. Diferența fundamentală dintre ChP și MP este în efectul ciclurilor [149].

ChP ar putea fi considerat ca polinomul determinant. De asemenea, este posibilă construirea unui polinom permanent π ca permanenta lui $(x \cdot [Id] - [Ad])$ [211].

Luând ca exemplu LiMn_2O_4 (**Figura III.1 a**, G_0 , materialul 1045561 din [25], $[Id_{G_0}]$ și $[Ad_{G_0}]$ sunt următoarele:

$$[Id_{G_0}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[Ad_{G_0}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$ChP_{G_0} = \det \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & x & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & x & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix}$$

$$ChP_{G_0} = x \cdot (x^6 - 6 \cdot x^4 + 4 \cdot x^2)$$

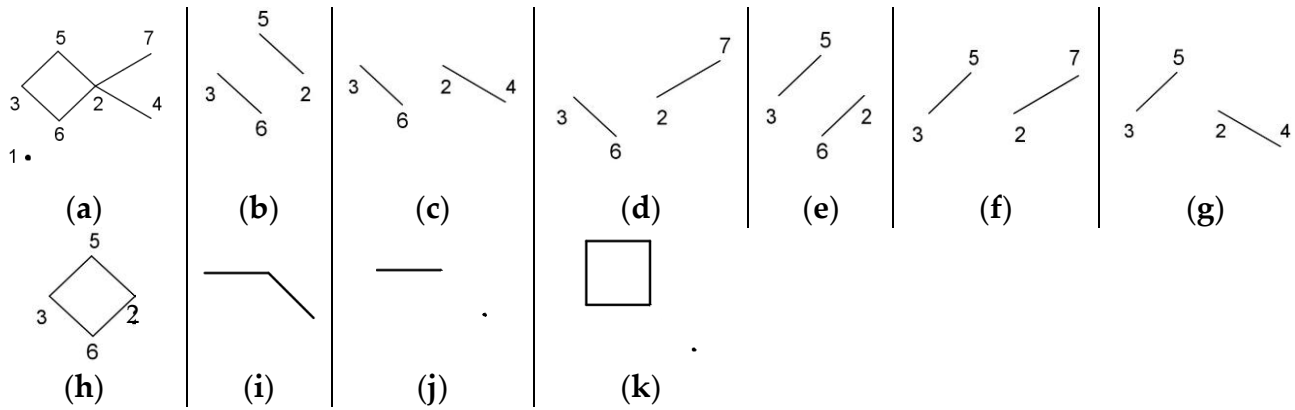


Figura III.1 (a) Reprezentare graf-teoretică a LiMn_2O_4 , materialul 1045561 (G_0); (b - g) muchii independente (și grafuri Sachs); (h) inel independent (și un graf Sachs); (i - k) grafuri Sachs improprii.

Deși nu este un polinom de numărare, o metodă de numărare elegantă pentru găsirea ChP , într-un număr limitat de cazuri, este cea a lui Sachs [212]. Un graf Sachs poate fi compus din muchii izolate, inele sau combinații. Le notăm cu B_2 („2” fiind numărul de vârfuri pe care le poate avea o muchie izolată) și R_m („m” fiind numărul de vârfuri din care este compus un inel). Numărul de muchii izolate = o și numărul de inele = p. Există o restricție în definiția unui graf Sachs: $2 \cdot o + p \cdot m = k$, unde k = numărul de vârfuri. Fie S_k mulțimea tuturor subgrafurilor (s) Sachs cu „k” vârfuri ale oricărui graf G și „a” fiind numărul total de vârfuri ale lui G . Numărul de componente ale subgrafului Sachs este $c(s)$ și numărul de inele $r(s)$. În acest caz, definiția ChP este:

$$ChP_G = \sum_{k \geq 0} \sum_{s \in S_k(G)} (-1)^{c(s)} \cdot 2^{r(s)} \cdot x^{a-k} \quad (1.2)$$

Folosind ecuația (1.2) și notând $q = \sum_{s \in S_k(G_0)} (-1)^{c(s)} \cdot 2^{r(s)} \cdot x^{7-k}$:

pentru $k = 0$, $q = x^7$;

pentru $k = 2$, deoarece acesta este cazul în care fiecare muchie reprezintă un subgraf Sachs, $q = (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} + (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} + (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} + (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} + (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} + (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} = 6 \cdot (-1)^1 \cdot 2^0 \cdot x^{7-2} = 6 \cdot (-1) \cdot 1 \cdot x^5 = -6 \cdot x^5$;

pentru $k = 3, 5, 6, 7$, se poate observa în **Figura III.1** i-k că acestea nu sunt subgrafuri Sachs;

pentru $k = 4$, din fiecare subgraf Sachs din **Figura III.1** b-g $q_{(b)} = q_{(c)} = q_{(d)} = q_{(e)} = q_{(f)} = q_{(g)} = (-1)^2 \cdot 2^0 \cdot x^{7-4}$ și din **Figura III.1** h $q_{(h)} = (-1)^1 \cdot 2^1 \cdot x^{7-4}$ (deoarece $c(s)$ numără atât muchiile, cât și inelele); ca atare pentru $k = 4$ $q = 6 \cdot 1 \cdot 1 \cdot x^3 + 1 \cdot (-1) \cdot 2 \cdot x^3 = 4 \cdot x^3$.

Însumând cele trei rezultate, obținem: $ChP_{G_0} = x^7 - 6 \cdot x^5 + 4 \cdot x^3$.

ChP admite extensii.

Extinderea polinomului caracteristic³

Metoda lui Hückel a orbitalilor moleculari este de fapt prima extensie a definiției *ChP*. Se folosește „determinantul secular” — determinantul unei matrici care este descompus ca $|E \cdot Id - Ad|$ (în loc de „ x ” se folosește energia sistemului „ E ”), pentru a aproxima tratamentul sistemelor de electroni π în molecule organice [213].

A doua extensie a *ChP* a fost găsită de Hartree [214,215] și Fock [216,217] mergând într-o direcție diferită cu aproximarea tratamentului funcției de undă. Ei au găsit de fapt aceeași problemă mai veche de vector propriu-valoare propriu (§20 în [218]; T1 în [219]) în tratamentul lui Slater [220,221] al orbitalilor moleculari. Mai general (și mai vechi), problema valorilor eigen (găsirea valorilor proprii și a vectorilor proprii) este implicată în orice matrice hessiană $[A]$ ($[Ad] \rightarrow [A]$, unde $[Ad]$ este matricea de adiacență) [222]. Polinomul Laplacian este un polinom legat de *ChP* (în **Tabelul III.1**). Aceasta utilizează o formă modificată (matricea Laplaciană, $[La]$) a matricei de adiacență ($[Ad]$), $[La] = [Dg] - [Ad]$, unde $[Dg]$ pur și simplu numără pe diagonala principală numărul de legături ale atomului (restul elementelor sale sunt nule; pentru comoditate în teoria grafurilor, a fost notat $[Dg]$, reprezentând gradul vârfului). *ChP* este legat și de polinomul de potrivire [223], degenerând la aceeași expresie pentru păduri (uniunea disjunctă a arborilor). Adaptând [224] pentru molecule, o potrivire „ k ” într-o moleculă este o potrivire cu exact „ k ” legături între diferiți atomi; pentru detalii §3.1 & §3.3 în [149]. Fiecare set care conține o singură muchie este, de asemenea, un set de muchii independent; setul gol ar trebui să fie tratat ca un set de muchii independent cu zero muchii — acest set este unic datorită constrângerii de a conecta diferiți atomi, unde potrivirea poate implica maxim $a/2$ legături, unde „ a ” este numărul de atomi. Este posibil să se numere k -potriviri [225], cu toate acestea, este o problemă grea [226], precum și să se exprime polinomul de numărare Z derivat [108] și polinomul de potrivire — ambele sunt definite folosind $n_i(k)$, numărul de „ k ” potriviri al moleculei selectate, așa cum se arată în **Tabelul III.1** (unde a este numărul de atomi).

Notăție	Formulă
<i>ChP</i>	$ x \cdot [Id] - [Ad] $
LaP	$ x \cdot [Id] - [Dg] + [Ad] $
Z, Q sau HP	$\sum_{k \geq 0} n_i(k) \cdot x^k$
α, M sau MP	$\sum_{k \geq 0} (-1)^k \cdot n_i(k) \cdot x^{a-2k}$

Tabelul III.1 Polinomul caracteristic (*ChP*), polinomul laplacian (LaP), polinomul Hosoya (HP) și polinoamele de potrivire (MP).

O descriere topologică a unei molecule necesită stocarea legăturilor (ca adiacențe sau muchii) dintre atomi și atomii înșiși (ca identități). Dacă această problemă este simplificată la maximum, prin ignorarea tipurilor de atom și legături, atunci molecula este văzută ca un graf nedirecționat și neponderat. Structura grafului poate fi adusă în spațiul informațional prin numerotarea atomilor. Din păcate, această procedură induce și un izomorfism — izomorfis-

³ Joița, D.-M.; Jäntschi, L. [197].

mul numerotării, care se poate prăbuși într-un timp polinomial nedeterminat de rezolvat [227]. Acesta este un motiv pentru dorința invariantelor de graf, de exemplu, care nu depind de numerotarea făcută pe graf.

Odată ce atomii (sau vârfurile) sunt numerotați, informațiile pot fi pur și simplu stocate ca liste de atomi (a) și muchii (b) (legături sau *bonds* în engleză), iar structura graf a moleculei este asociată cu perechea $G = (a, b)$. O reprezentare echivalentă se obține folosind matrici. Adiacențele ([Ad]) sunt pur și simplu stocate cu 0 când nicio legătură nu leagă atomii și 1 când există o legătură ce leagă atomii. Matricea de identitate ([Id]) identifică atomii plasând 1 pe diagonala principală și 0 în rest.

O extensie naturală este stocarea în matricea identității ([Id]) a valorilor non-unității în loc de unități ($[Id]_{i,j} = 1 \rightarrow [Id]_{i,j} \neq 1$) ținând cont de tipurile de atomi, precum și de a stoca în matricea de adiacență ([Ad]) valorile neunitare în loc de unități ținând cont de tipurile de legături ($[Ad]_{i,j} = 1 \rightarrow [Ad]_{i,i} \neq 1$). Această extensie a fost studiată în contextul derivării descriptorilor structurali utili pentru relațiile structură-proprietate.

Topologia unei structuri de graf ar putea fi exprimată sub formă de matrici și, în acest sens, trei dintre ele sunt mai frecvent utilizate: distanță, identitate și adiacență (vârf-vârf, margine-margine și vârf-margine), de exemplu **Tabelul III.2**:

Definiție	V: Set finit	$E \subseteq V \times V$	$G = G(V,E)$
Nume (concept)	V: vârfuri (atomi)	E: margini (legături)	G: graf (moleculă)
Cardinalitatea	$ V = a$	$ E = b$	$\forall a, V \leftrightarrow \{1, \dots, a\}$
Exemplu	$G = „ABC”$	$V = \{1,2,3\}$	$E = \{(1,2), (2,3)\}$

Tabelul III.2 Grafuri moleculare clasice.

Matricele reflectă graful 1:1 dacă întregul graf este stocat (fiecare pereche de vârfuri stocată de două ori, în ambele direcții). Enumerarea dublă a muchiilor se reflectă în simetrie față de diagonala principală prin matricile pătrate de adiacență ale vârfurilor ([Ad]) și prin adiacența muchiilor precum se observă în **Figura III.2**:

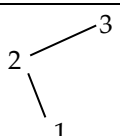
Graf	Identitate	Adiacență	Distanță
	[Id]	[Ad]	[Di]
	1 2 3	1 2 3	1 2 3
	1 1 0 0	1 0 1 0	1 0 1 2
	2 0 1 0	2 1 0 1	2 1 0 1
	3 0 0 1	3 0 1 0	3 2 1 0

Figura III.2. Exemple de codificări: identități [I], a adiacențe [A] și adistanțe [D]

O problemă extrem de importantă în chimie este identificarea unică a unui compus chimic. Dacă identificarea vizuală (privind structura) pare simplă, pentru compuși de dimensiuni mari, această alternativă nu mai este viabilă. Datele legate de structura compușilor stocați în spațiul informațional pot oferi răspunsul la această problemă. Cu toate acestea, odată cu stocarea structurii compusului, se ridică o altă problemă, și anume numerotarea arbitrară a atomilor (**Figura III.3**).




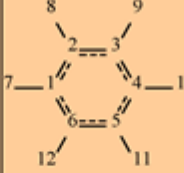


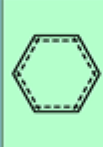
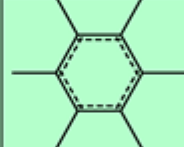

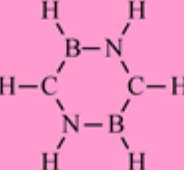
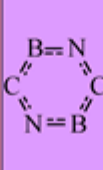
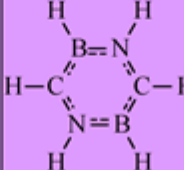
&	clasic	clasic și H	tip leg.	tip leg. și H	grupe
numerie					topologie moleculară clasică
a-numerice					grafuri cu numărare și greutate
tip de atomi					grafuri fără izomorfism cu greutate
					grafuri cu vârfuri etichetate
					formulă chimică structurală (grafuri etichetate)

Figura III.3. Grafuri vs molecule – un exemplu.

Pentru o structură chimică cu a atomi stocați ca graf (molecular clasic), există exact a! posibilități de numerotare a atomilor. Din păcate, stocarea grafurilor ca liste de muchii și (eventual) vârfuri nu oferă un instrument direct pentru a verifica această diferențiere arbitrară din cauza numerotării. Aceeași situație se aplică matricelor de adiacență. Prin urmare, căutarea invarianților de graf este perfect justificată: un invariant (invariant de graf) nu depinde de numerotare. Matricea de adiacență nu este un invariant de graf și, prin urmare, este necesar să mergem mai departe decât adiacențele.

Clasele importante de invarianți de graf sunt polinoamele de graf. Această categorie aparține polinomului caracteristic (*ChP*) – un invariant de graf care codifică proprietăți importante ale grafului. Pe de altă parte, din păcate, *ChP* nu reprezintă o imagine bijectivă a grafului, deoarece există diferite grafuri cu același *ChP* (numindu-se cospectrale – cele mai mici grafuri cospectrale apar pentru 5 vârfuri [228]). Pentru a număra grafurile cospectrale, ar trebui să comparați A000088 și A082104 [229,230]. Situația ideală este ca invariantul să fie atribuit în mod unic fiecărei structuri, dar acest tip de invariant este greu de găsit. O procedură de generare a unui invariant nedegenerat propusă de IUPAC este identificatorul chimic internațional (InChI), care convertește structura chimică într-un tabel de conectivitate exprimat ca o serie unică și previzibilă de caractere [231].

În ciuda acestui inconvenient (nereprezentând o imagine bijectivă a grafului) datorită legăturii sale cu împărțirea energiei [213], *ChP* pare a fi una dintre cele mai bune alternative pentru cuantificarea informațiilor din structura chimică.

Anterior, s-a arătat performanța estimării și/sau predicției *ChP* pe izomerii nonan [178,232,233], precum și în cazul nano-structurilor de carbon [234,235]. Mai mult, a fost dezvoltat un mediu online pentru a ajuta în calcularea polinoamelor pe baza diferitelor abordări; inclusiv *ChP* [236].

Atunci când faceți calcule pe grafuri moleculare, este important să luați în considerare faptul că, creșterea simplificării reprezentării grafului (cum ar fi neglijarea tipului atomu-

lui, ordinilor legăturilor, geometriei în favoarea topologiei) duce la degenerarea întregului fond de calcule posibile și că există mai multe molecule cu aceeași reprezentare. Acest lucru este favorabil pentru problemele care caută similitudini, dar este în mod clar nefavorabil pentru problemele care caută lipsa similitudinilor.

Un pas necesar pentru a realiza o acoperire mai bună a dualismului de similitudine vs disimilitudine este construirea și utilizarea unei familii de descriptori moleculari, suficient de mare pentru a putea oferi răspunsuri pentru toți. În mod firesc, o astfel de familie ar trebui să posede un „cod genetic”, și anume o serie de variabile din care să (re)producă unul sau mai mulți descriptor/i molecular/i (unul câte unul), toți descriptorii obținându-se așadar în același mod. Este de așteptat ca toți indivizii familiei să fie independenți de numerotarea atomilor din moleculă (ar trebui să fie invarianți moleculari).

Construirea unei astfel de familii trebuie să ia în considerare următoarele:

- Moleculele poartă atât caracteristici topologice, cât și geometrice (vezi **Figura III.4**);
- Tipurile de atomi și de legături sunt factori esențiali în exprimarea proprietăților măsurabile;
- Numerotarea atomilor și/sau a legăturilor induce un izomorfism nedorit;
- Geometria și tipurile de legături induc alte tipuri de izomorfism.

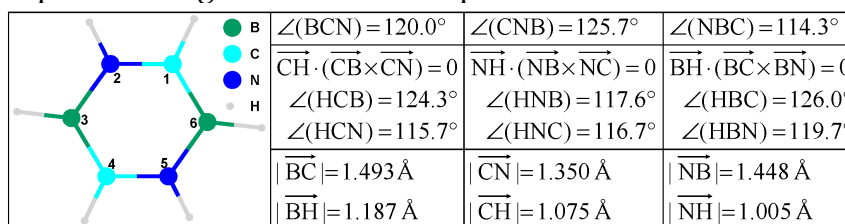


Figura III.4. Geometria moleculară—un exemplu.

Reprezentarea unei molecule ar putea fi realizată folosind identitatea și adiacența, așa cum este prezentat în **Figura III.5**.

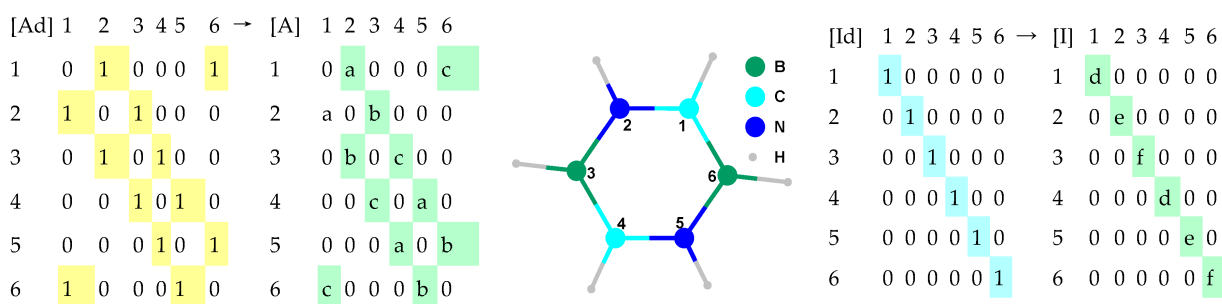


Figura III.5. Geometria moleculară tradusă în adiacență și identitate — un exemplu.

Identitățile distincte din **Figura III.5** sunt date folosind a, b și c ca variabile în cazul adiacenței și folosind d, e și f ca variabile în cazul identității. Acest formalism permite introducerea unei extensii naturale a *ChP* de la grafuri la molecule. Nu există determinism în selectarea valorilor a-f. În orice caz,

- Dacă $a = b = c = d = e = f = 1$ atunci $\text{ChPE} \leftarrow \text{ChP}$ ca în topologia moleculară clasică.
- Dacă $a = b = c = 1,5-1$, atunci $[A]$ reprezintă (inversa) ordinii legăturilor.
- Dacă $a = 1,35-1$, $b = 1,448-1$ și $c = 1,493-1$, atunci $[A]$ ține cont de (inversa) distanței geometrice (în Å).

- Dacă $d = 12/294$, $e = 14/294$ și $f = 10,8/294$, atunci [I] reprezintă masa atomică în raport cu U_{uo} , ultimul element din perioada a 7-a a sistemului de elemente.
- Dacă $d = 2267/\varrho_{ref}$, $e = 1026/\varrho_{ref}$, și $f = 2460/\varrho_{ref}$, atunci [I] ține cont de densitatea relativă în stare solidă (în m^3/kg); ϱ_{ref} poate fi fixat la 30.000.
- Dacă $d = 2,55/4,00$, $e = 3,04/4,00$ și $f = 2,04/4,00$, atunci [I] ține cont de electro-negativitatea în raport cu Fluorul când este utilizată scara Pauling.
- Dacă $d = 1086,2/1312$, $e = 1402,3/1312$ și $f = 800,6/1312$, atunci [I] reprezintă primul potențial de ionizare relativ la potențialul de ionizare pentru hidrogen.
- Dacă $d = 3820/3820$, $e = 63/3820$ și $f = 2573/3820$, atunci [I] ține cont de punctul de topire în raport cu alotropul carbonului diamant (în K).
- Dacă $d = 1/4$, $e = 1/4$ și $f = 1/4$, atunci [I] reprezintă numărul de atomi de hidrogen atașați în raport cu scorul CH_4 .

Extensia completă ar putea include și matricea distanțelor (Figura III.6).

[Ad]	1	2	3	4	5	6	[Id]	1	2	3	4	5	6	[Di]	1	2	3	4	5	6	[Id]	1	2	3	4	5	6
1	0	1	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	1	0	1	2	3	2	1	1	1	0	0	0	0	0
2	1	0	1	0	0	0	2	0	1	0	0	0	0	2	1	0	1	2	3	2	2	0	1	0	0	0	0
3	0	1	0	1	0	0	3	0	0	1	0	0	0	3	2	1	0	1	2	3	3	0	0	1	0	0	0
4	0	0	1	0	1	0	4	0	0	0	1	0	0	4	3	2	1	0	1	2	4	0	0	0	1	0	0
5	0	0	0	1	0	1	5	0	0	0	0	1	0	5	2	3	2	1	0	1	5	0	0	0	0	1	0
6	1	0	0	0	1	0	6	0	0	0	0	0	1	6	1	2	3	2	1	0	6	0	0	0	0	0	1
↓ extension ↓							↓ extension ↓							↓ extension ↓													
[A]	1	2	3	4	5	6	[I]	1	2	3	4	5	6	[D]	1	2	3	4	5	6	[I]	1	2	3	4	5	6
1	0	a	0	0	0	c	1	d	0	0	0	0	0	1	0	a	h	k	g	c	1	d	0	0	0	0	0
2	a	0	b	0	0	0	2	0	e	0	0	0	0	2	a	0	b	g	j	i	2	0	e	0	0	0	0
3	0	b	0	c	0	0	3	0	0	f	0	0	0	3	h	b	0	c	i	l	3	0	0	f	0	0	0
4	0	0	c	0	a	0	4	0	0	0	d	0	0	4	k	g	c	0	a	h	4	0	0	0	d	0	0
5	0	0	0	a	0	b	5	0	0	0	0	e	0	5	g	j	i	a	0	b	5	0	0	0	0	e	0
6	c	0	0	0	b	0	6	0	0	0	0	0	f	6	c	i	l	h	b	0	6	0	0	0	0	0	f

Figura III.6 Geometria moleculară tradusă în adiacență, identitate și distanță — un exemplu.

ChP extins are următoarea formulă:

$$ChP \leftarrow |x \cdot [I] - [C]|,$$

unde [C] este fie [A], fie [D], identitățile (a, b și c din [I]) și conectivitatea (d, e, f, g, h, i, j, k și l de la C).

Intrările cu o singură valoare (0 și $1 \neq 0$ pentru definiția clasică a ChP) pot fi actualizate la multi-valoare (orice valoare), ținând cont de diferiți atomi și legături. Evident, ChP clasic se găsește când $a = b = c = d = e = f = 1$ și $g = h = i = j = k = l = 0$.

$EChP$ este o familie cu $96 (n_1 * n_c)$ formule polinomiale și 288 ($*n_L$) liniarizate, conducând la un total de 576.288 de indivizi. Software-ul FreePascal a fost folosit pentru implementare deoarece este foarte rapid și permite utilizarea unei versiuni paralelizate cu multi-CPU ($ChP17ChP.pas$) [237]. Programul necesită fișiere de intrare în formatul „ ChP ” (cum ar fi $chfp_17_q.asc$, vezi) și utilizează un program de filtrare (PHP) ($\rightarrow chfp_17_t.asc$), precum și un fișier de proprietăți moleculare (cum ar fi $chfp_17$). [prop].txt). Programul de filtrare a fost conceput pentru a căuta degenerări și pentru a reduce cantitatea de descriptori prin eliminarea celor degenerați.

Familia de descriptori *EChP* a fost apoi utilizată cu o serie de compuși chimici pentru a obține asocieri între structură și proprietăți ca ecuații de regresie.

IV.2.3. Conclusions and further work

EChP s-a dovedit util pentru estimarea proprietăților moleculare investigate.

EChP este o extensie naturală a *ChP*. Scalurile proprietăților atomice au fost selectate mai mult sau mai puțin arbitrar și vor fi investigate în continuare pentru a găsi soluția optimă. În plus, distanța inversată părea a fi cea mai bună alternativă, dar trebuie efectuate analize suplimentare pentru a demonstra această observație.

III.2. Polinomul permanent

Deși este rareori utilizat în aplicații chimice, este interesant să se caute aplicații ale polinomului permanent (π). Sunt legate de o clasă mai generală de polinoame - imanante. Definiția sa este asemănătoare *ChP*:

$$\pi = \text{per}(x \cdot [Id] - [Ad]) \quad (2.1)$$

Permanentă a unei matrice este definită ca suma fără semn a tuturor permutărilor.

Similar *ChP*, se folosesc matricile $[Id_{G_0}]$ și $[Ad_{G_0}]$:

$$\pi_{G_0} = \text{per} \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & x & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & x & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix}$$

$$\pi_{G_0} = x^7 + 6 \cdot x^5 + 8 \cdot x^3$$

$$ChP_{G_0} = x^7 - 6 \cdot x^5 + 4 \cdot x^3$$

Există o similitudine cu metoda de numărare a lui Sachs, dar o modificare a teoremei [204]:

$$\pi_G = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \cdot x^{a-k} \sum_{s \in S_k(G)} 2^{r(s)} \quad (2.2)$$

Pentru exemplul nostru:

$$\pi_{G_0} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \cdot x^{a-k} \sum_{s \in S_k(G_1)} 2^{r(s)},$$

denotând $q = (-1)^k \cdot x^{a-k} \sum_{s \in S_k(G_1)} 2^{r(s)}$,

pentru $k = 0$, $\sum_{k=0} q = x^7$;

pentru $k = 2$, $\sum_{k=2} q = 6 \cdot x^5$;

pentru $k = 3, 5, 6, 7$, se poate observa în **Figura III.1 i-k** că acestea nu sunt subgrafuri Sachs;

pentru $k = 4$, din fiecare subgraf Sachs din **Figura III.1 b-g** $q_{(b)} = q_{(c)} = q_{(d)} = q_{(e)} = q_{(f)} = q_{(g)} = (-1)^2 \cdot 2^0 \cdot x^{7-4}$ și din **Figura III.1 h** $q_{(h)} = (-1)^1 \cdot 2^1 \cdot x^{7-4}$ (deoarece $c(s)$ numără atât muchiile, cât și inelele); ca atare pentru $k = 4$ $q = 6 \cdot 1 \cdot 1 \cdot x^3 + 1 \cdot (-1) \cdot 2 \cdot x^3 = 4 \cdot x^3$.

DeFord a descoperit că determinantul permanent al unui arbore este echivalent cu indexul Z și poate fi extins la arbori ponderați și la structuri chimice mai generale [239].

Dacă două structuri chimice, de exemplu G_1 și G_2 (graful 1 și graful 2), au același polinom permanent, atunci G_1 este un partener per-cospectral al lui G_2 . Un graf G_1 se spune că este caracterizat de polinomul său permanent dacă toți partenerii per-cospectrali ai lui G_1 au grafuri izomorfe față de G_1 . Grafurile complete, stelele, grafurile bipartite complete regulate și ciclurile impare sunt caracterizate de polinoamele lor permanente [204].

Cash a dezvoltat un program de calculator pentru calcularea permanentului. El a identificat unele dintre proprietățile și utilizările sale cu aplicare pentru grafurile chimice neponderate. A furnizat coeficienți și rădăcini (zerouri) pentru structuri reprezentative [240].

Li, Qin și Zhang au studiat mai întâi suma coeficienților lui π pentru lanțurile hexagonale [241]. Li și Wei au studiat suma coeficienților lui π pentru lanțurile octogonale [242]. Ulterior, au identificat printre toate lanțurile fenilenice toate grafurile care minimizează/maximizează suma coeficienților lui π , raza spectrală, indexul Hosoya și indexul Merrifield-Simmons [243].

Wu și Lai au investigat proprietățile sumelor permanente ale grafurilor. Au demonstrat formule recursive pentru a calcula suma permanentă. Au găsit ordinea grafurilor în raport cu suma. Au determinat limitele superioară și inferioară ale acestei sume și grafurile unicyclice extreme corespunzătoare [244].

Huo a propus o metodă îmbunătățită bazată pe Transformata Fourier rapidă pentru calcularea π și a aplicat-o grafurilor de tip fullerenă până la C_{56} [245].

π al o-bifenilenă este egal cu π al 3,3-dimetilhexan împărțit la x^2 , posibil o proprietate a unei clase de structuri [240].

III.3. Polinomul de potrivire

Polinomul de potrivire (MP) a fost descoperit independent de mai multe ori din 1970. A fost numit și polinomul defectului de potrivire, polinomul de referință și polinomul aciclic (acest din urmă termen a ieșit din uz, iar un alt polinom l-a reciclat [196]). Denumirea actuală este dată de Farrell [246]. Este notat cu „ α ”, M sau MP .

MP este o consecință a teoriei topologice a aromaticității [247]. Este important atât în teoriile hidrocarburilor saturate, cât și în cele conjugate, sau în descrierea aromaticității 3D a boranilor. [248]. MP nu este util în a discrimina dacă un graf este aciclic sau nu, nici dacă graful are componente netriviiale [223]. Deutsch a arătat că indecșii topologici bazați pe grade pot fi calculați în mod curent din MP [249].

Folosind CoP general (ecuația 0) se poate defini $n_i(k)$ = numărul de moduri posibile în care „ k ” muchii pot fi alese într-o moleculă (graf chimic) astfel încât muchiile „ k ” (alese) să nu fie adiacente:

$$MP = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \cdot n_i(k) \cdot x^{a-2k} \quad (3.1)$$

unde „ a ” este numărul total de vârfuri, $a \geq 2 \cdot k$ [250]. Dacă vorbim despre o moleculă aciclică, MP este egal cu ChP [149].

Luând în considerare exemplul nostru, putem alege:

pentru $k=0$, $n_i(k)=1$, deoarece există o singură posibilitate cu zero muchii, și anume \emptyset ;

pentru $k=1$, $n_i(k)=6$, numărul de muchii;

și pentru $k=2$, $n_i(k)=6$ posibilități reprezentate în **Figura III.1 (b) - (g)**:

Ulterior, pentru $k > 2$, $n_i(k) = 0$. Astfel:

$$MP_{G_0} = 1 \cdot 1 \cdot x^7 + (-1) \cdot 6 \cdot x^5 + 1 \cdot 6 \cdot x^3$$

Să numărăm într-un mod diferit, considerând subgrafurile aciclice Sachs [238]:

$$MP = \sum_{s \in S^0} (-1)^{c(s)} \cdot x^{a-k} \quad (3.2)$$

Să repetăm afirmația de mai sus: „Dacă vorbim despre o moleculă aciclică, MP este egal ChP ”. În exemplul nostru, acest lucru nu este adevărat și putem scrie acest lucru matematic. Singurul subgraf ciclic Sachs apare în cazul ChP pentru $k=4$ în **Figura III.1 (h)** $q_{(h)} = (-1)^1 \cdot 2^1 \cdot x^{7-4} = -2 \cdot x^3$. Ca atare :

$$MP_{G_0} = ChP_{G_0} - (-2 \cdot x) = x^7 - 6 \cdot x^5 + 4 \cdot x^3$$

Încercând să facem același lucru în comparație cu polinomul permanent, există o diferență de semn. Pentru π , termenul (-1) depinde de k , iar pentru MP depinde de numărul de componente. Toate monoamele sunt pozitive pentru π . Singurul subgraf ciclic Sachs în cazul lui π este pentru $k=4$ din **Figura III.1 (h)** $q_{(h)} = (-1)^4 \cdot 2^1 \cdot x^{7-4} = +2 \cdot x$, ceea ce ar duce la $MP_{G_0} = \pi_{G_0} - (+2 \cdot x)$; dar trebuie să rezolvăm și restul coeficienților, este mai ușoară scrierea: $\pi_{G_0} = |MP_{G_0} + (+2 \cdot x)| = |x^5 - 5 \cdot x^3 + 4 \cdot x + (+2 \cdot x)|$.

Se pot alege grafuri astfel încât MP-ul lor să fie același cu cel al mai multor polinoame ortogonale importante. De exemplu, polinomul Hermite este egal cu MP-ul grafului complet cu n vârfuri [149].

Un obiect combinatorial, polinomul rook, util în studiul unor probleme combinatoriale clasice, este în esență punctul de referință (MP) al unui graf bipartit [223].

Knop și Trinajstić leagă MP de ChP [196].

Se poate spune că MP este în esență polinomul Hosoya [149]:

$$MP(G, x) = x^a \cdot HP(G, -x^{-2}) \quad (3.3)$$

III.4. Polinomul Hosoya

Cel mai simplu polinom este polinomul Hosoya (polinomul Wiener sau polinomul de numărare Z , notat Q sau HP), definit doar pentru grafuri conectate de către Hosoya în 1971 [108]. Este un rezultat natural al introducerii numerelor neadiacente în renașterea interesului pentru teoria grafurilor. Hosoya l-a numit polinomul Wiener datorită proprietății sale remarcabile: derivând HP o dată la $x=1$ conduce la indexul Wiener [142].

Se utilizează în studierea proprietăților fizico-chimice: punctul de fierbere, entropia, căldura de vaporizare sau energia electronilor π conjugați [251], sau pentru clasificarea și codificarea hidrocarburilor [252]. Corelația dintre indexul topologic Z și numeroase proprietăți termodinamice a fost studiată temeinic [178].

Se obține prin numărarea muchiilor independente. Folosind CoP general (ecuația 0), se poate defini $n_i(k)$ = numărul de moduri posibile în care „k” muchii pot fi alese într-o moleculă (graf chimic) astfel încât nici o muchie „k” (aleasă) să fie adiacentă:

$$HP = \sum_{k \geq 0} n_i(k) \cdot x^k \quad (4.1)$$

În mod firesc, pentru $x=1$, indexul topologic $HP=Z$ [253].

Luând exemplul nostru, putem alege:

pentru $k=0$, $n_i(k)=1$, deoarece există o singură posibilitate de a alege zero muchii, și anume \emptyset ;

pentru $k=1$, $n_i(k)=6$, numărul de muchii;

și pentru $k=2$, $n_i(k)=6$ posibilități reprezentate în **Figura III.1 (b)-(g)**:

Ulterior, pentru $k > 2$, $n_i(k) = 0$. Astfel:

$$HP_{G_0} = 1 \cdot x^0 + 6 \cdot x^1 + 6 \cdot x^2$$

Randić a propus matricea Hosoya, iar mai târziu Plavšić și colaboratorii au descoperit relațiile dintre aceste numere de cale și indexul Z. Alegând fiecare pereche i,j , excluzând calea i,j , repetând algoritmul de numărare de mai sus și lăsând diagonala nulă, s-ar ajunge la matricea Hosoya $[H_{G_0}]$, exemplificată pentru G_0 [254]:

$$[H_{G_0}] = \begin{pmatrix} 0 & 13 & 13 & 13 & 13 & 13 & 13 \\ 13 & 0 & 9 & 10 & 11 & 11 & 10 \\ 13 & 9 & 0 & 8 & 9 & 9 & 8 \\ 13 & 10 & 8 & 0 & 9 & 9 & 8 \\ 13 & 11 & 9 & 9 & 0 & 10 & 9 \\ 13 & 11 & 9 & 9 & 10 & 0 & 9 \\ 13 & 10 & 8 & 8 & 9 & 9 & 0 \end{pmatrix}$$

Așa cum am menționat anterior, HP este în esență polinomul de potrivire (MP):

$$HP(G, x) = (-i\sqrt{x})^a \cdot MP\left(G, \frac{i}{\sqrt{x}}\right) \quad (4.2)$$

unde a este numărul de vârfuri [149,255].

Pentru $x = \sqrt{-1}$, HP este legat de polinomul caracteristic (*ChP*):

$$HP = x^4 \cdot ChP\left(G, \frac{i}{\sqrt{x}}\right) \quad (4.3)$$

Poate fi, de asemenea, extins. Polinomul sextet al fiecărei molecule de benzenoid catacondensat neramificat coincide cu HP al unui anumit graf (numit arbore Gutman). Gutman a stabilit o relație între funcția Coulson și HP [209].

HP este înrudit cu multe alte polinoame de numărare. Polinomul de potrivire al mai multor serii de grafuri este identic cu polinoamele ortogonale tipice, cum ar fi polinoamele Chebyshev, Hermite și Laguerre [173]. Wang a determinat o clasă de grafuri unicitice și a obținut ordonarea indecșilor Hosoya și Merrifield-Simmons [256]. Grafurile cu index Hosoya minim coincid cu cele cu index Merrifield-Simmons maxim [251,257,258]. Mărimile absolute ale coeficienților HP și polinomului corespunzător al unui graf omidă sunt identice cu cele ale polinoamelor sextet și de rezonanță ale unui sistem benzenoid. Acești coeficienți sunt cei ai polinomului de independență [247]. Valoarea polinomului de independență pentru $x=1$

este egală cu indexul Merrifield-Simmons [259]. Gutman și Hosoya au găsit polinoame HP și de independență identice pentru ciclurile C_n ($n > 2$) [260].

III.5. Polinoame imanante

Majoritatea polinoamelor nu sunt simple datorită naturii lor matematice non-triviale. La prima vedere, există un număr mare de polinoame de numărare. Ca atare, unificarea lor poate fi considerată cel mai bun lucru posibil și care poate rezolva toate problemele. Din păcate, în această direcție se poate doar ura „mult noroc”, deoarece ar putea exista un polinom având caracteristici ascunse care face exact acest lucru. S-au făcut unele încercări de a unifica conceptele de polinoame. Polinomul imanant (d_λ , care nu trebuie confundat cu rădăcinile, notate cu „ x ” în acest capitol) este o generalizare naturală pentru polinoamele permanente și caracteristice.

Fără analizarea polinoamelor, proprietățile colective ale secvențelor invariante ale grafurilor nu ar fi fost niciodată descoperite [149]. Unele conexiuni neobișnuite între grafurile moleculare pot fi determinate utilizând polinomul imanant.

Fie $M = (m_{ij})$ o matrice de ordinul „ a ”, iar „ χ ” unul dintre caracterele ireductibile ale grupului de permutații simetrice S_a . Imanantul lui $[M]$, corespunzător caracterului „ χ ” al lui S_a , este definit ca:

$$d_\chi(M) = \sum_{\tau \in S_a} \chi(\tau) \prod_{i=1}^a m_{i\tau(i)} \quad (5.1)$$

Dacă $\chi(\tau) = \varepsilon(\tau)$ este un semn de caracter, atunci d_χ este determinantul. Pentru $\chi(\tau) = 1$ pentru orice „ τ ”, d_χ este permanentul [149]. Polinomul imanant al matricii $[M]$ este $d_\chi(x[\text{Id}] - [M])$. Dacă $[M]$ este $[Ad]$ (corespunzător unui graf G), îl numim polinomul imanant al grafului G .

La fel cum ultimul termen al lui $ChP_G = \det(x \cdot [\text{Id}] - [Ad])$ este $\det[Ad]$, iar ultimul termen al lui $\pi_G = \text{per}(x \cdot [\text{Id}] - [Ad])$ este $\text{per}[Ad]$, și ultimul termen al polinomului imanant este imanantul lui $[Ad]$, exprimat ca $\text{imm}_\lambda(x \cdot [\text{Id}] - [Ad])$.

Pentru un graf G , „ λ ” se referă la o partiție τ nedescrescătoare a lui „ a ”. „ τ ” este o permutare a lui S_a . „ ξ ” este o clasă conjugată, mulțimea tuturor „ τ ” pentru un graf „ a ” dat, care are aceeași structură ciclică. Matricea $\chi = P(a) \times P(a)$ este matricea caracterelor ireductibile ale lui S_a , unde $P(a)$ este funcția de partiție. Elementele lui „ χ ” sunt $\chi(\lambda, \xi)$ indexate conform unei partiții „ λ ” și unei clase conjugate „ ξ ”. Astfel:

$$d_\lambda(G, x) = \sum_{i=0}^a \sum_{\tau(i)} \chi(\lambda, \tau) \cdot x^{a-i} \prod_{j=1}^a ([\text{Id}] - [Ad])_{j, \tau(j)} \quad (5.2)$$

este polinomul imanant. Pentru $i = a$ se obține imanantul $\text{imm}_\lambda([Ad])$.

Să exemplificăm cum se notează o partiție. Pentru numărul „6” putem scrie sumele „6+0”, „5+1”, „4+2”, „4+1+1”, „3+2+1”, „2+2+2”, „1+1+1+1+1+1”, etc., toate egale cu „6”. Partiții precum $\{4,1,1\}$ și $\{2,2,2\}$ sunt necrescătoare și pot fi scrise $\{4,1^3\}$ și respectiv $\{2^3\}$. În ultima

variantă este suficient să spunem că sunt descrescătoare. Pentru partițiile $\{6,1^0\}$, $\{5,1^1\}$, $\{4,1^2\}$, ... $\{1^6\}$ am putea scrie o formă generală $\lambda = \{r, 1^{a-r}\}$. În cazul lui $\{6,1^0\}$, nu trebuie să ne gândim la $1^0=1$, ci la 6 vârfuri și un vârf independent numărat de zero ori (\emptyset). Când $r=1$, imanantul partiției $\lambda_1=\{1^a\}$ este determinantul lui $[Ad]$, iar pentru $r=a$ se obține $\{a,1^{a-a}\}=\{a,1^0\}=\{a\}$ permanentul lui $[Ad]$.

În continuare, vom lua de exemplu graful nostru G_0 care are 7 vârfuri ($a=7$). Partițiile necrescătoare ale lui 7 sunt:

$\{7\}$, dar aceasta nu reprezintă o partiție a G_0 deoarece nu există 7 atomi conectați;

$\{6,1\}$, $\{5, 2\}$, dar $\{5, 2\}$ nu reprezintă o partiție a G_0 deoarece nu există 5 atomi conectați și alți 2 atomi conectați;

$\{5, 1, 1\}$ (notată și $\{5, 1^2\}$), $\{4,3\}$ nu există, $\{4, 2, 1\}$, $\{4, 1^3\}$, $\{3^2, 1\}$, $\{3, 2^2\}$ nu există, $\{3, 2, 1^2\}$, $\{3, 1^4\}$, $\{2^3, 1\}$, $\{2^2, 1^3\}$, $\{2, 1^5\}$, $\{1^7\}$, însumând 15 partiții dintre care doar 11 există pentru G_0 . Prin urmare, G_0 va avea o familie de 11 polinoame imanante, câte unul pentru fiecare partiție.

Pentru partiția $\{6, 1\}$ se obține ChP și pentru partiția $\{1^7\}$ se obține π .

Vom determina polinomul imanant pentru partiția $\lambda = \{5, 1, 1\}$, exemplificat în **Figura III.7 (a) - (e)**:

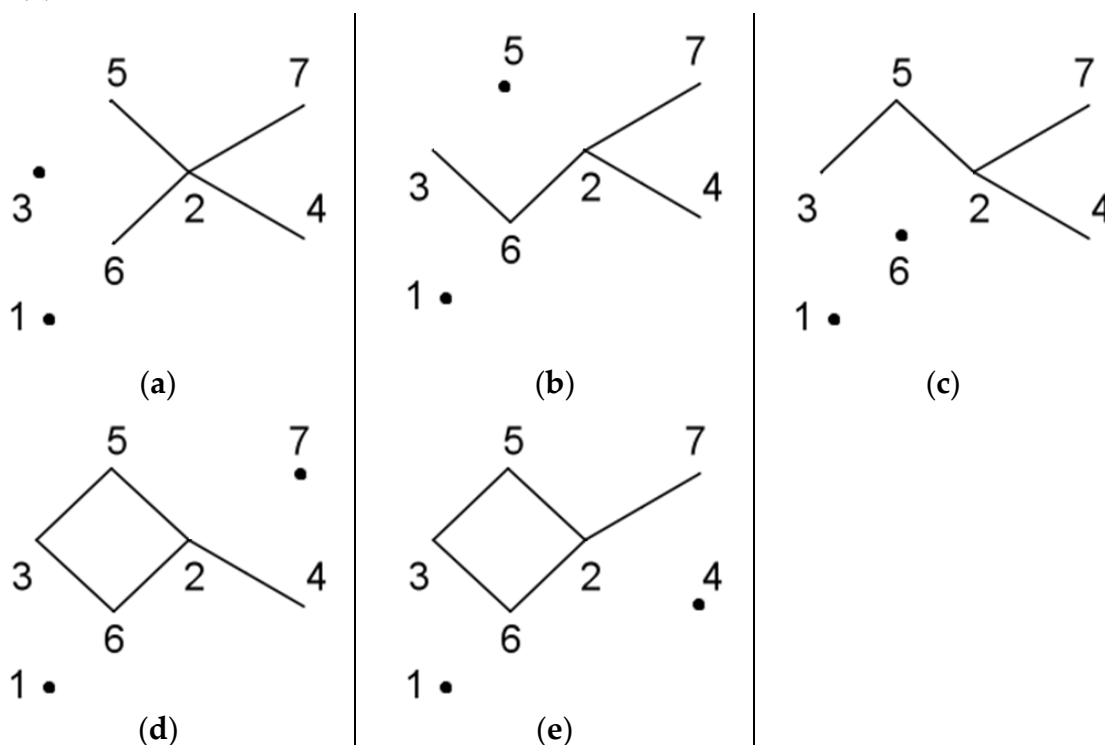


Figura III.7. Reprezentarea partiției $\{5, 1, 1\}$ a G_0 .

Notând $[Ad]$ a subgrafului din **Figura III.7 (a)** doar ca $[Ad_{(a)}]$, avem:

$$[Ad_{(a)}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\det(x[Id] - [Ad_{(a)}]) = \det \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & x & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix} = x^7 - 4x^5$$

Pentru subgraful (b) avem: $\det(x[Id] - [Ad_{(b)}]) = x^7 - 4x^5 + 2x^3$

Pentru subgraful (c) avem: $\det(x[Id] - [Ad_{(c)}]) = x^7 - 4x^5 + 2x^3$

Pentru subgraful (d) avem: $\det(x[Id] - [Ad_{(d)}]) = x^7 - 5x^5 + 2x^3$

Pentru subgraful (e) avem: $\det(x[Id] - [Ad_{(e)}]) = x^7 - 5x^5 + 2x^3$

Însumând cele patru rezultate, obținem:

$$d_{\{5,1,1\}}(G_0, x) = 5x^7 - 22x^5 + 8x^3.$$

Cash generalizează polinomul de potrivire la o clasă de polinoame imanante aciclice; generalizează teorema lui Sachs la polinoame imanante și oferă relații între imanante și alte proprietăți ale grafului [211].

III.6. Polinomul laplacian

Matricea $[La] = [Dg] - [Ad]$ este uneori numită matricea Kirchhoff a lui G (vezi Teorema Matrice-Arbore atribuită de obicei lui Kirchhoff) sau matricea admitanței [261]. $[Dg]$ (din gradul vârfului) numără pur și simplu numărul de muchii (legăturile-valențe ale atomului) de pe diagonala principală [197]. Polinomul laplacian (LaP), numit polinomul caracteristic laplacian, este trivial $ChP[La]$. Mulțimea de valori proprii este denumită spectrul lui $[La]$ al unui graf G sau spectrul laplacian al lui G [262]. Spectrul este util pentru calcularea numărului Wiener [149].

Polinomul laplacian este definit ca:

$$LaP = |x \cdot [Id] - [Dg] + [Ad]| \quad (6)$$

Pentru exemplul nostru:

$$\begin{aligned} LaP_{G_0} &= \left| \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right| \\ &= \begin{vmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x-4 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & x-2 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & x-1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & x-2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & x-2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x-1 \end{vmatrix} \\ &= x^7 - 12 \cdot x^6 + 51 \cdot x^5 - 96 \cdot x^4 + 80 \cdot x^3 - 24 \cdot x^2 \end{aligned}$$

III.7. Polinoame Zagreb

Deși indexul Zagreb este mult mai vechi, primul polinom Zagreb a fost introdus în 2009 [263,264]. Acestea sunt utile pentru: studierea structurii nanotuburilor; studiul activităților anti-inflamatorii; modelarea fracției de legare și a clearance-ului cefalosporinelor la om; sau energia totală a electronului π [265–267]. Acestea pot fi obținute luând în considerare fiecare muchie „e” = „uv” și numărând muchii „n” adiacente (vecine) (valențe sau grade ale vârfurilor „u” și „v”):

$$ZgP_1 = \sum_{k>0} x^{n_u(k)+n_v(k)} \quad (7.1)$$

$$ZgP_2 = \sum_{k>0} x^{n_u(k) \cdot n_v(k)} \quad (7.2)$$

$$ZgP_3 = \sum_{k>0} x^{|n_u(k)-n_v(k)|} \quad (7.3)$$

$$ZgP_4 = \sum_{k>0} x^{n_u(k) \cdot (n_u(k)+n_v(k))} \quad (7.4)$$

$$ZgP_5 = \sum_{k>0} x^{n_v(k) \cdot (n_u(k)+n_v(k))} \quad (7.5)$$

De exemplu, pentru G_0 având 6 muchii, considerăm muchia „1” între atomii 2 și 4, deci $u=2$ și $v=4$. Pentru vârful $u=2$ există patru muchii adiacente. Pentru $v=4$ există doar o muchie adiacentă, legătura între atomii 2 și 4.

Ca atare:

pentru $k=1$, $u=2$, $v=4$, $n_u(k)=4$, $n_v(k)=1$;

pentru $k=2$, $u=2$, $v=5$, $n_u(k)=4$, $n_v(k)=2$;

pentru $k=3$, $u=2$, $v=6$, $n_u(k)=4$, $n_v(k)=2$;

pentru $k=4$, $u=2$, $v=7$, $n_u(k)=4$, $n_v(k)=1$;

pentru $k=5$, $u=3$, $v=5$, $n_u(k)=2$, $n_v(k)=2$;

și pentru $k=6$, $u=3$, $v=6$, $n_u(k)=2$, $n_v(k)=2$.

Rescriind ecuațiile 7.1-7.5:

$$ZgP_{1G_0} = x^{4+1} + x^{4+2} + x^{4+2} + x^{4+1} + x^{2+2} + x^{2+2}$$

$$ZgP_{2G_0} = x^{4 \cdot 1} + x^{4 \cdot 2} + x^{4 \cdot 2} + x^{4 \cdot 1} + x^{2 \cdot 2} + x^{2 \cdot 2}$$

$$ZgP_{3G_0} = x^{4-1} + x^{4-2} + x^{4-2} + x^{4-1} + x^{2-2} + x^{2-2}$$

$$ZgP_{4G_0} = x^{4 \cdot (4+1)} + x^{4 \cdot (4+2)} + x^{4 \cdot (4+2)} + x^{4 \cdot (4+1)} + x^{2 \cdot (2+2)} + x^{2 \cdot (2+2)}$$

$$ZgP_{5G_0} = x^{4+1} + x^{2 \cdot (4+2)} + x^{2 \cdot (4+2)} + x^{4+1} + x^{2 \cdot (2+2)} + x^{2 \cdot (2+2)}$$

III.8. Polinomul sextetului

Polinomul sextetului (notat cu SP sau σ) reflectă descrierea combinatorie atât a structurilor Kekulé, cât și a conceptului lui Clar despre sextetul aromatic. Își găsește utilizări în calculul energiei de rezonanță a hidrocarburilor benzenoide sau în enumerarea structurilor Kekulé ale catafusenelor.

Numărând sexteturile deconectate (neadiacente), dar rezonante, folosind CoP-ul general (ecuația 0), se poate defini $n_r(k)$ așa-numitul „număr de sextet rezonant”, numărul de moduri posibile în care „k” sexteturi rezonante reciproc pot fi alese într-o moleculă (graf chimic):

$$SP = \sum_{k \geq 0} n_r(k) \cdot x^k \quad (8)$$

Exemplul nostru cel mai utilizat din **Figura III.1 (a)** nu este potrivit pentru acest polinom, iar benzo[p,q,r] tetrafenul (G_2) din **Figura III.9 (a)** îi va lua locul, dar și G_1 din **Figura III.8** va fi util.

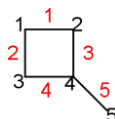


Figura III.8. Reprezentare graf-teoretică a metil-ciclo-butanului (G_1).

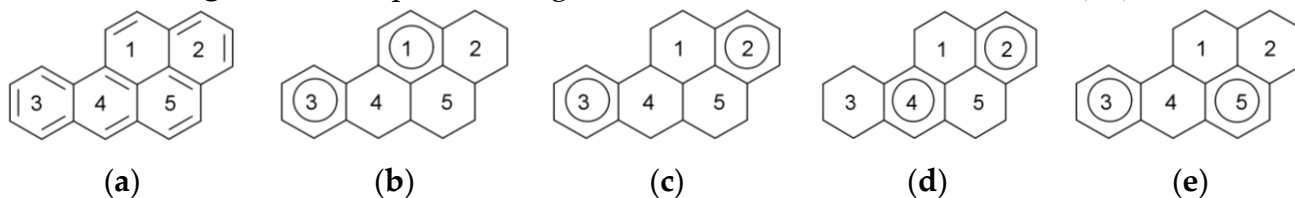


Figura III.9. (a) benzo[p,q,r] tetrafenul (G_2); (b) - (e) posibilitățile de a alege două sextete care rezonează reciproc.

Putem alege :

pentru $k=0$, $n_r(k)=1$, deoarece există o singură posibilitate de a alege zero sexteturi, \emptyset ;

pentru $k=1$, $n_r(k)=5$, numărul de inele benzenice;

și pentru $k=2$, $n_r(k)=4$, posibilitățile sunt prezentate în **Figura III.9 (b)-(e)**:

Astfel:

$$SP_{G_2} = 1 \cdot x^0 + 5 \cdot x^1 + 4 \cdot x^2$$

Gutman și colaboratorii au evidențiat un polinom combinatorial (Zhang–Zhang) din care se pot deduce structurile Kekulé, numărul și formulele Clar [268]. Gutman și Borovićanin au detaliat câteva aplicații pentru polinomul Zhang–Zhang (ζ) și au arătat relația sa cu SP pentru anumite structuri [269]:

$$SP = \zeta(x - 1)$$

SP este, de asemenea, legat de polinomul de rezonanță (PA) al lui Aihara prin relația [247,270]:

$$SP = x^{a-2b} \cdot AP,$$

unde a = vârfuri și b = muchii.

Polinomul sextet extinde conceptul de neadiacent al lui Hosoya la sextetele aromatice și a fost extins la polinoamele R și cell [196,247,271]. Este înrudit cu polinoamele Clar, cel de independență, king, culoare și stea [272].

III.9. Polinomul de independență

Polinomul de independență este definit mai întâi de Gutman și Harary [273,274], este strâns legată de HP și MP. Poate fi găsită ca I, IP, polinomul mulțimilor independente, poli-

nomul Fibonacci sau polinomul mulțimilor stabile [275]. Poate fi găsită prin numărarea mulțimilor de „k” vârfuri independente folosind CoP general (ecuația 9):

$$IP = \sum_{k \geq 0} n_{ia}(k) \cdot x^k \quad (9)$$

Pentru exemplul nostru, putem alege:

pentru $k=0$, $n_{ia}(k)=1$, deoarece există un singur caz în care sunt zero vârfuri independente, și anume \emptyset ;

pentru $k=1$, $n_{ia}(k)=7$, numărul de vârfuri;

pentru $k=2$, $n_{ia}(k)=15$ mulțimi de două vârfuri independente (1,2; 1,3; 1,4; 1,5; 1,6; 1,7; 2,3; 3,4; 3,7; 4,5; 4,6; 4,7; 5,6; 5,7; 6,7);

pentru $k=3$, $n_{ia}(k)=14$ mulțimi de trei vârfuri independente (1, 2, 3; 1, 3, 4; 1, 3, 7; 1, 4, 5; 1, 4, 6; 1, 4, 7; 1, 5, 6; 1, 5, 7; 1, 6, 7; 3, 4, 7; 4, 5, 6; 4, 5, 7; 4, 6, 7; 5, 6, 7);

și pentru $k=4$, $n_{ia}(k)=5$ mulțimi de patru vârfuri independente (1, 3, 4, 7; 1, 4, 5, 6; 1, 4, 5, 7; 1, 4, 6, 7; 1, 5, 6, 7).

Ca atare: $IP_{G_0} = 1 + 7 \cdot x + 15 \cdot x^2 + 14 \cdot x^3 + 5 \cdot x^4$

Polinomul opus care ar număra vârfurile dependente (adiacente) este polinomul clic [257]. Hoede a definit un polinom clic și a descoperit că este în esență același cu polinomul de dependență [276,277].

Alte polinoame au fost declarate de independență, cum ar fi HP, clic sau SP [149].

III.10. Polinoame King și domino

Polinomul rege (KP) a fost propus pentru aflarea numărului de modalități de aranjare a regilor care nu iau parte la joc pe un anumit poliominio (sau tablă de șah) de o dimensiune și formă arbitrară [278]. Ca analog hexagonal al poliominio-ului s-ar putea alege hidrocarburi aromatice policiclice. Polinoamele king și domino ar putea fi utilizate pentru corelarea problemelor de rețea. Vom propune antracenu și analogul său poliominio în **Figura III.10 (a)**, respectiv **(b)** pentru a ilustra modalitățile de aranjare a regilor și domino-urilor:

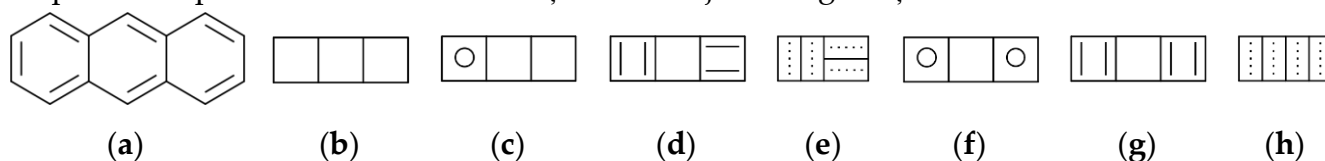


Figura III.10. (a) antracenu; (b) analogul său poliominio (G_3); (c) o modalitate de aranjare a unui singur rege; (d) model Kekulé corespunzător lui (c); (e) model de domino corespunzător lui (c); (f) singura modalitate prin care se pot aranja doi regi care nu luptă; (g) model Kekulé corespunzător lui (f); (h) model domino corespunzător (f).

Numărând numărul de moduri de aranjare a regilor care nu iau alți regi (n_k) prin intermediul CoP general (ecuația 0), se poate defini $n_{nk}(k)$ = numărul de moduri posibile în care pot fi aranjați „k” regii care nu iau regi într-o moleculă (graf chimic):

$$KP = \sum_{k \geq 0} n_{nk}(k) \cdot x^k \quad (10.1)$$

Se pot alege:

pentru $k=0$, $n_{nk}(k)=1$, deoarece există o singură posibilitate de a aranja zero regi **Figura III.10 (b)**;

pentru $k=1$, $n_{nk}(k)=3$, numărul de celule;

și pentru $k=2$, $n_{nk}(k)=1$, posibilitate reprezentată în **Figura III.10 (f)**:

$$KP_{G_3} = 1 \cdot x^0 + 3 \cdot x^1 + 1 \cdot x^2$$

KP este legat de polinoamele de independență și rook [272,279].

Polinomul domino este aproape același. Trebuie să numărăm: modelele improprie = regi improprie = ik = modele de regi care nu au corespondenți Kekulé; și modelele degenerate = regi degenerate = dk = modele de regi cu doi corespondenți Kekulé.

$$DP = KP - ik + dk \quad (10.2)$$

Balasubramanian și Ramaraj au dezvoltat un program pentru generarea polinoamelor [280].

III.11. Polinomul Cluj

Diudea a propus polinomul Cluj în 2007, după ce a publicat o interpretare indirect legată de numărarea conținutului [272]. Polinomul Cluj numără proximitățile vârfurilor într-un graf conectat. Se formează prin alegerea a două vârfuri inițiale și numărarea numărului de vârfuri care sunt mai apropiate de fiecare dintre cele două inițiale.

Descriptorii legați de acest polinom sunt utili în prezicerea punctului de fierbere, a indexului de retenție cromatografică, a energiei de rezonanță pentru unii compuși polihexalici planari și a toxicității unui număr de dibenzo-furani.

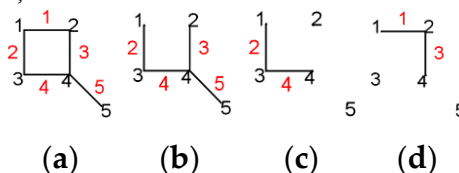


Figura III.11 (a) **Figura III.8** (G_1); (b) ce rămâne după ștergerea traseului dintre vârfurile „1” și „2”; (c)-(d) ce rămâne după ștergerea traseelor dintre vârfurile „1” și „5”.

Folosind ecuația generală 0, putem scrie:

$$CjP = \sum_{k>0} n_k \cdot x^k, \quad (11)$$

unde „ n ” numără de câte ori „ k ” vârfuri sunt mai apropiate de un alt vârf (sau cu alte cuvinte, proximitatea atomului „ i ” față de orice alt atom „ j ”).

Pentru a construi o matrice $[Cj_{G_1}]$ în care se pot stoca informațiile, în exemplul nostru din **Figura III.11 (a)**, putem alege două vârfuri, găsi cea mai scurtă cale dintre ele și exclude muchiile acelei căi. Alegând vârfurile „1” și „2”, trebuie să ștergem muchia „1” din **Figura III.11 (b)**. Se poate observa că există două vârfuri mai aproape de „1”, iar acestea sunt vârfurile „1” și „3”. Există trei vârfuri mai aproape de „2”: vârfurile „2”, „4” și „5”.

$$[Cj_{G_1}] = \begin{pmatrix} 0 & 2 & & & \\ 3 & 0 & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$

Luând de exemplu cea mai scurtă cale între vârfurile „1” și „5”, avem două cazuri. Acest lucru ar pune unele probleme în unele structuri chimice, dar vom reveni asupra acestui aspect. În structura noastră, un caz prezentat în **Figura III.11 (c)** ar fi calea 1, 2, 4, 5, lăsând două vârfuri „1” și „3”, care sunt mai aproape de „1”. Al doilea caz prezentat în **Figura III.11 (d)** ar fi calea 1, 3, 4, 5, lăsând două vârfuri „1” și „2”, mai aproape de „1”. Avem același număr, deci nu avem probleme suplimentare în construirea matricei noastre. Doar vârful „5” este mai aproape de „5”. Ca atare, putem completa matricea noastră:

$$[Cj_{G_1}] = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 0 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 3 & 0 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Numărarea aparițiilor fiecărui caracter:

pentru $k=1$, $n_k=7$, numărând de câte ori apare „1” în matricea noastră;

pentru $k=2$, $n_k=6$, numărând de câte ori apare „2” în matricea noastră;

pentru $k=3$, $n_k=6$, numărând de câte ori apare „3” în matricea noastră;

pentru $k=4$, $n_k=1$, deoarece „4” apare o dată,

ca atare:

$$CjP_{G_1} = 1 \cdot x^4 + 6 \cdot x^3 + 6 \cdot x^2 + 7 \cdot x$$

Revenim la cazul problematic în care există mai mult de o cale, cea mai scurtă între două vârfuri. Trebuie să verificăm dacă rezultatele sunt aceleași pentru fiecare caz (metilciclobutanul nu a demonstrat nicio problemă în acest sens). Dacă rezultatele diferă, trebuie să ținem cont de faptul că există mai multe tipuri de polinoame Cluj. Cel pe care l-am calculat ia în considerare cele mai scurte căi și poate fi notat cu p : $CjP_{G_1,p}$, iar matricea $Cj_{G_1,p}$. Un alt polinom care rezolvă problema cu mai mult de o cale, cea mai scurtă, poate fi formulat dacă luăm în considerare doar muchiile: $Cj_{G_1,e}$ (denumit „e” de la „edges” - „muchii”).

$$Cj_{G_1,e} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 3 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Și polinomul corespunzător: $CjP_{G_1,e} = 1 \cdot x^4 + 4 \cdot x^3 + 4 \cdot x^2 + 1 \cdot x$

Există și alte două polinoame cluj care numără cele mai lungi căi („detour” - „ocoliri”), $CjDe_{G_1,e}$ și $CjDe_{G_1,p}$. Polinoamele calculate mai sus pot fi notate pentru diferențiere $CjDi_{G_1,e}$ și $CjDi_{G_1,p}$, unde Di reprezintă distanța (cea mai scurtă).

III.12. Polinomul omega

Un alt polinom de numărare a fost propus de Diudea pentru a explica tăieturile opuse într-o rețea bipartită [281,282]. Este util în descrierea topologică a structurilor benzenoide, a nano-structurilor tubulare, precum și în numărarea TI-urilor [183].

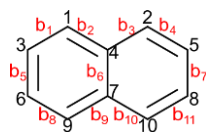


Figura III.12 Reprezentare graf-teoretică a naftalinei (G_4).

Mai întâi trebuie să definim codistanța pentru naftalină în **Figura III.12** Muchiile b_5 (între vârful „3” și vârful „6”) și b_6 (între vârful „4” și vârful „7”) se numesc codistante (pe scurt: b_5 co b_6) dacă distanțele d dintre vârfuri satisfac:

$$\begin{cases} d(3,4) = d(6,7) = m; \\ d(3,7) = d(6,4) = m + 1. \end{cases} \text{ sau } \begin{cases} d(3,4) = d(6,7) = m + 1; \\ d(3,7) = d(6,4) = m. \end{cases}$$

Fie $CO_{(5)} = (b_1, b_2, \dots, b_p)$ (în general) mulțimea tuturor muchiilor codistante la b_5 . Dacă toate elementele lui $CO_{(5)}$ satisfac și:

$$\begin{cases} b_i \text{ co } b_i & (12.1) \\ b_i \text{ co } b_j \iff b_j \text{ co } b_i & (12.2) \\ b_i \text{ co } b_j \ \& \ b_j \text{ co } b_h \iff b_i \text{ co } b_h & (12.3) \end{cases}$$

atunci $CO_{(5)}$ este o secvență ortogonală (oc) a lui G_4 . Avem în special aceste $CO_{(5)} = (b_5, b_6, b_7)$, $CO_{(1)} = (b_1, b_9)$, $CO_{(2)} = (b_2, b_8)$, $CO_{(3)} = (b_3, b_{11})$, $CO_{(4)} = (b_4, b_{10})$, $CO_{(6)} = (b_5, b_6, b_7)$, $CO_{(7)} = (b_5, b_6, b_7)$, $CO_{(8)} = (b_2, b_8)$, $CO_{(9)} = (b_1, b_9)$, $CO_{(10)} = (b_4, b_{10})$ și $CO_{(11)} = (b_3, b_{11})$.

Graful G_4 se numește co-graf dacă și numai dacă mulțimea de muchii $B(G_4)$ este reuniunea dintre disjunctul $oc(G_4)$: $CO_1 \cup CO_2 \cup \dots \cup CO_p = B$ și $CO_i \cap CO_j = \emptyset$ pentru $i \neq j$, $i, j = 1, 2, \dots, p$. CO_{1-5} îndeplinesc aceste cerințe. Dacă oricare două muchii consecutive ale unei astfel de secvențe sunt codistante (satisfăcând 13.1 și 13.2) și aparțin aceleiași fețe a învelișului, secvența se numește bandă cvasi-ortogonală „qoc”. Această explicație este ceva mai scurtă și este posibil să nu acopere toate posibilitățile, cea originală putând fi găsită în [281]. O notă pentru structurile nechimice: orice alt graf luat în considerare trebuie să fie un graf conex.

Numărarea $n_{qoc}(k)$ = numărul de qoc-uri de lungime „k”:

$$\Omega = \sum n_{qoc}(k) \cdot x^k \quad (12.4)$$

În exemplul nostru de naftalină (G_4), luând în considerare CO_{1-5} oc-urile disjuncte:

pentru $k=0$, $n_{qoc}(k)=0$;

pentru $k=1$, $n_{qoc}(k)=0$;

pentru $k=2$, $n_{qoc}(k)=4$, CO_{1-4} ;

pentru $k=3$, $n_{qoc}(k)=1$, CO_5 .

$$\Omega_{G_4} = 4x^2 + x^3$$

Diudea și colaboratorii au derivat o relație între polinomul Sadhana (SdP) și Ω [283,284]:

$$SdP(G) = SdP'(G, 1) = \Omega'(G, 1)(\Omega(G, 1) - 1)$$

III.13. Polinomul Wheland

Polinomul Wheland numără structurile canonice pentru fiecare grad de excitație într-o hidrocarbură nesaturată sau aromatică. Nu este un invariant [285], însă poate fi generalizat pentru a număra toate structurile de valență, ceea ce îl face un invariant [286]. Acesta asociază un polinom fiecărei molecule sau grupare de atomi, unde „n” este numărul de structuri de gradul „k” de excitație.

$$WP = \sum_{k \geq 0} n_k \cdot x^k, \quad (13.1)$$

Se pot lua câteva exemple simple. Pentru lanțuri liniare mici; $WP(L_0) = WP(L_1) = 1$; 1,3-butadiena din **Figura III.13 (a)** este un exemplu de lanț liniar cu două legături duble:

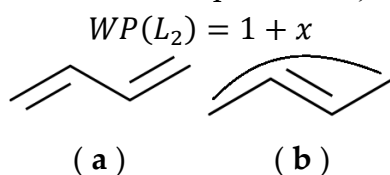


Figura III.13 (a) singura structură fără grad de excitație;

(b) singura structură cu gradul de excitație unu.

Pentru un lanț liniar cu trei legături duble, vom folosi 1,3,5-hexatriena din **Figura III.14 (a)**:

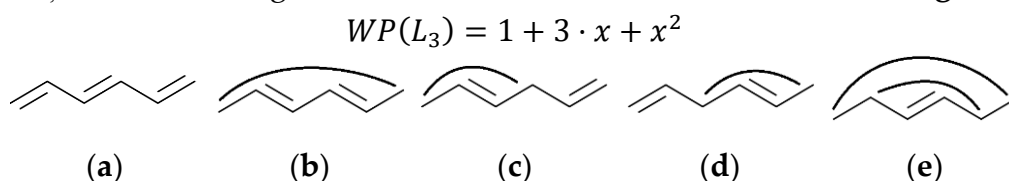


Figura III.14 (a) singura structură fără grad de excitație; **(b)-(d)** trei structuri cu gradul de excitație unu; **(e)** singura structură cu gradul de excitație doi.

Pentru structuri mai mari, Wheland a oferit o metodă de calculare a WP:

$$WP(L_k) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{k! \cdot (k-1)!}{j! \cdot (j+1)! \cdot (k-j)! \cdot (k-j-1)!} \cdot x^j \quad (13.2)$$

De exemplu:

$$WP(L_4) = 1 + 6 \cdot x + 6 \cdot x^2 + x^3$$

$$WP(L_5) = 1 + 10 \cdot x + 20 \cdot x^2 + 10 \cdot x^3 + x^4$$

Pentru inele cu două legături duble $WP(R_2) = 2$. Benzenul din **Figura III.15 (a)** este un exemplu de inel cu trei legături duble:

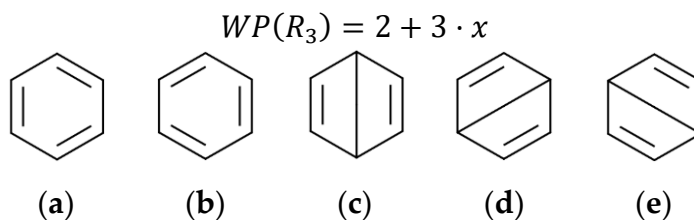


Figura III.15 (a)-(b) cele două structuri fără grad de excitație;

(c)-(e) trei structuri cu gradul de excitație unu.

Pentru structuri mai mari există și o modalitate de a le calcula:

$$WP(R_k) = WP(L_k) + (1 - x) \cdot WP(L_{k-1}) \quad (13.3)$$

De exemplu:

$$WP(R_4) = 2 + 8 \cdot x + 4 \cdot x^2$$

$$WP(R_5) = 2 + 15 \cdot x + 20 \cdot x^2 + 5 \cdot x^3$$

Se pot lua în considerare și structuri mai complexe. Există o altă regulă care prevede: dacă G_i diferă de G_j printr-o singură linie suplimentară și dacă această linie împreună cu punctele sale finale împarte G_i în G_{i1} și G_{i2} , atunci:

$$WP(G_i) = WP(G_j) + (1 - x) \cdot WP(G_{i1}) \cdot WP(G_{i2}) \quad (13.4)$$

Pentru aceasta, se poate lua ca exemplu naftalina și folosi fără legături duble (G_5 în **Figura III.16 (b)**):

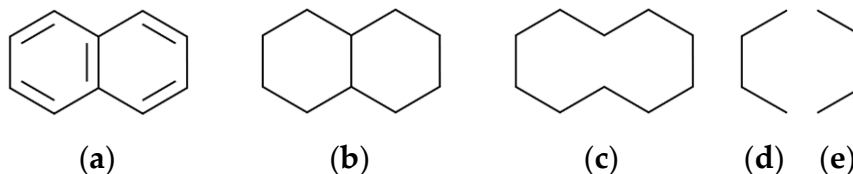


Figura III.16 (a) reprezentare graf-teoretică a naftalinei (G_4) **Figura III.12 (b)** reprezentare graf-teoretică a naftalinei fără legături duble (G_5); **(c)** ceea ce rămâne după îndepărtarea unei muchii convenabile pentru a aplica ecuația 13.4 (G_6); **(d)-(e)** rezultatul împărțirii lui G_5 pentru a aplica ecuația 13.4 (G_7 și G_8).

$$WP(G_5) = WP(G_6) + (1 - x) \cdot WP(G_7) \cdot WP(G_8)$$

G_6 este un ciclu ce poate fi populat cu 5 legături duble. Deoarece G_7 din **Figura III.16 (d)** este echivalent cu G_8 din **Figura III.16 (e)** în termenii polinomului Wheland:

$$WP(G_5) = WP(R_5) + (1 - x) \cdot WP(L_2)^2$$

Wheland a mers chiar mai departe, definind acest polinom pentru cazul structurilor cu un electron nepereche. WP , împreună cu ChP , MP , HP , SP și un polinom ciclic, sunt strâns legate de π energia electronului β a sistemelor conjugate. Aceste polinoame și proprietățile lor pot fi utilizate pentru a prezice stabilitatea unui astfel de sistem [196].

III.14. Polinomul μ

Întrucât polinoamele caracteristice și cele de potrivire sunt atât de studiate, un efort de unificare a lor a condus la un alt polinom (propus ca polinomul Mülheim, dar care a ajuns să fie μ). Acesta este relevant pentru teoria topologică a moleculelor conjugate [238]. A fost proiectată o funcție aleasă în mod rezonabil, $\mu(G, t)$ (unde t se numește variabilă de tip r-tuplu), care ar transforma continuu ChP_G în MP_G atunci când parametrul t se schimbă de la unu la zero [287,288]:

$$\mu(G, \vec{t}) = \mu(G, \vec{t}, x) \equiv ChP(G, x) \equiv MP(G, \lambda)$$

$$\mu(G, \vec{1}, x) = ChP(G, x) \quad (14.1)$$

$$\mu(G, \vec{0}, \lambda) = MP(G, \lambda) \quad (14.2)$$

$$\mu = \sum_{s \in S_k} (-1)^{c(s)} \cdot 2^{r(s)} \cdot x^{a-k(s)} T(s) \quad (14.3)$$

Fie S_k mulțimea tuturor subgrafurilor Sachs (s) având „ k ” vârfuri ale oricărui graf G , iar „ a ” fiind numărul total de vârfuri ale lui G . Numărul de componente ale subgrafului Sachs este $c(s)$, iar numărul de inele este $r(s)$.

Componentele vectorului t pot fi interpretate ca ponderi ale ciclurilor. Dacă $t = 0$, atunci toate grafurile ciclice Sachs au o contribuție zero la suma 14.3 și, prin urmare, se reduce la ecuația 14.2. În cazul în care $t = 1$, toate $T(s)$ sunt egale cu unu și (3) se reduce la (1). Componentele vectorului t pot fi considerate ca ponderi ale ciclurilor corespunzătoare, prin care contribuie la ecuația de sumare de tip Sachs (3) [238].

Dacă $t \neq 0,1$, zerourile lui μ nu sunt neapărat reale, spre deosebire de ChP și MP .

μ pare a fi un caz special al clasei generale de polinoame, F [287]. Ulterior, Farrell și Wahid au oferit câteva rezultate generale care pot fi utilizate pentru a construi clase din ce în ce mai mari din orice clasă dată [289].

Radenkovic și colaboratorii au folosit variabila de tip r -tuplu (t) a lui μ pentru a oferi o explicație matematică a efectului fragmentelor fenil-ciclopentadienil, amplificând intensitatea conjugării ciclice în inelul cu cinci membri [290].

Gutman și Polansky au dezvoltat o metodă de analiză a energiei totale a electronilor π , sarcina electronilor π și ordinul legăturilor electronilor π și au formulat o serie de reguli topologice de tip modulo 4 [196].

μ include cazuri speciale și ale altor polinoame în afară de ChP și MP : polinoamele circuit dacă ponderile ciclului sunt alese astfel încât toate ciclurile de aceeași dimensiune să aibă ponderi egale; sau polinomul β [149].

Gutman prezintă direcții suplimentare pentru un polinom auxiliar similar [291].

III.15. Polinomul FP

Într-un alt efort în direcția unificării, Farrell [287] a introdus polinomul F (polinomul familiei uitate) în 1979. Este util pentru studierea structurii nano-tuburi-lor și nano-tori-lor [292]. Nu trebuie confundat cu acest polinom F pentru diagramele de legături orientate, bune pentru a distinge nodurile și legăturile de imaginile lor în oglindă [293].

Fie F o familie de grafuri conexe. Fiecărui element $\alpha \in F$ îi putem asocia o pondere w_α sau doar x . Fie G un graf. O acoperire F a lui G este un subgraf de încadrare al lui G în care fiecare componentă aparține lui F . Pentru simplitate, o acoperire F va fi doar o acoperire (C). Se notează și definește polinomul FP , ecuația 15:

$$FP = \sum x(C) \quad (15)$$

Este util să știm câte acoperiri pot fi desenate. Se consideră $G = G_1$ (Figura III.8 sau Figura III.17 (a)) și se scriu matricile de adiacență $[Ad_{G_1}]$ și de grad $[D_{G_1}]$ pentru G_1 .

Fie $[A] = [D_{G_1}] - [Ad_{G_1}]$:

$$[A] = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

În continuare trebuie calculați cofactorii ($C_{i,j}$), ceea ce implică și calcularea minorilor ($M_{i,j}$). Toți cofactorii sunt 4, așa că vom exemplifica doar unul pentru elementul de pe rândul 5, coloana 4:

$$M_{5,4} = \det \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} = (-1) \cdot 4 = -4$$

$C_{i,j} = (-1)^{i+j} \cdot M_{i,j}$, ca atare $C_{5,4} = (-1)^{5+4} \cdot M_{5,4} = 4$.

În **Figura III.17** există G_1 **(a)** și cele 4 acoperiri ale lui G_1 **(b-e)**:

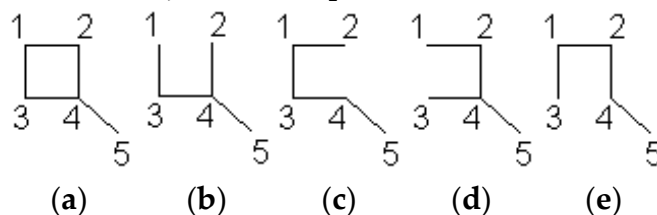


Figura III.17. **(a)** G_1 ; **(b-e)** cele 4 acoperiri ale lui G_1 .

Cu fiecare acoperire a lui G se poate asocia un monom $\pi(C) = \prod \alpha w_\alpha$ unde produsul este preluat asupra tuturor componentelor acoperirii. $FP_{G_1} = \sum \pi(C)$, unde suma este preluată asupra tuturor acoperirilor din G .

Alsharafi și Alameri au calculat FP pentru nano-tuburi și nano-tori V-fenilenice [292]. Salman și colaboratorii au investigat FP pentru rețeaua hexagonală HX_n , rețeaua de tip fagure HC_n , rețeaua de foi de silicat SL_n și rețeaua de oxid OX_n [294]. Jeyanthi și Selvarajan au descris o aplicație a FP pentru proiectarea farmaceutică [295].

Polinomul μ pare a fi un caz special al FP [238].

Polinomul de acoperire Clar este, de asemenea, un tip de FP [296].

Dacă fiecare membru non-nodal al FP constă dintr-un singur bloc, atunci numim clasa corespunzătoare de polinoame FP , polinoame bloc. Polinoamele de potrivire, caracteristice și permanente sunt polinoame B ; stelele și căile nu sunt blocuri și, prin urmare, nu dau naștere la polinoame B [297]. Polinomul B generalizează polinomul cromatic strict [298]. Acestea nu trebuie confundate cu polinomul β .

III.16. Polinomul β

Polinomul β (polinomul caracteristic pentru circuit) este util în calcularea efectului unui circuit individual asupra diferitelor proprietăți ale electronilor π ale unei molecule policiclice conjugate, în special asupra energiei totale a electronilor π [149]. Aihara [299], a conceptualizat-o, iar Li și colaboratorii [300] au oferit o soluție completă pentru a o susține.

Se definește folosind MP . Fie un graf G cu cel puțin un inel C_i (rețineți că acestea nu mai sunt acoperiri, sunt cicluri), ecuația 16:

$$\beta(G, C_i) = MP(G) \pm 2 \cdot MP(G - C_i) \quad (16)$$

Pentru un circuit de tip Hückel se folosește „-” și „+” pentru un circuit de tip Möbius [301,302]. Pentru exemplul nostru (**Figura III.17 (a)**) și îndepărtând singurul inel din moleculă se obține $G_1 - C_i$:

$$MP_{G_1} = 1 \cdot 1 \cdot x^5 + (-1) \cdot 5 \cdot x^3 + 1 \cdot 4 \cdot x$$

$$MP_{(G_1 - Ci)} = 1$$

$$\beta_{(G_1, Ci)} = x^5 - 5 \cdot x^3 + 4 \cdot x - 2$$

Hückel a presupus că electronii π pot fi tratați separat de cei implicați în legăturile sigma pentru compușii organici nesaturați. De fapt, un orbital π este antisimetric pentru reflexie prin planul moleculei, în timp ce unul sigma este simetric. Un sistem conjugat monociclic cu un circuit cu $(4n + 2)$ membri este stabil (aromatic), iar cel cu un circuit cu $4n$ membri este instabil (anti-aromatic). Există o regulă generalizată a lui Hückel pentru sistemele conjugate policiclice. Stabilitatea anulelor Möbius depinde și de modurile de conjugare ciclică a electronilor π , dar prezintă tendința opusă stabilității lui Hückel anulene [301,302].

Recent, Gutman a generalizat conceptul de energie de rezonanță al lui Aihara. Energia ciclului depinde de mărimea ciclului corespunzător [303]. Unele dificultăți legate de energia de rezonanță topologică sunt discutate în [288,304,305].

III.17. Polinomul ciclic (Knop și Trinajstić)

Polinomul ciclic (notat în lucrarea noastră CyP , poate fi găsit și ca PC) este mai general decât polinomul sextet, deoarece enumeră inele cu 6, 10, 14 membri în hidrocarburile benzenoide și este util pentru exprimarea energiei de rezonanță, așa cum este descris de Knop și Trinajstić [196].

Un ciclu constă dintr-o secvență de noduri adiacente și distincte într-un graf. Singura excepție este că primul și ultimul nod al secvenței ciclului trebuie să fie același nod. Putem concluziona că fiecare ciclu este un circuit, contrariul nu este adevărat, dar fiecare circuit hamiltonian este un ciclu. Un graf cu cicluri se numește graf ciclic, unul fără cicluri – graf aciclic, iar dacă acesta din urmă este și un graf conex, îl numim arbore. Scriem C_i și C_j doar pentru a diferenția cele două polinoame. Același inel poate fi atât tip Hückel, cât și hamiltonian, sau celelalte variante. Pentru un chimist este în primul rând un inel. Poate fi mai bine diferențiat prin context, cum ar fi: circuit Hückel versus circuit Möbius și circuit hamiltonian versus circuit eulerian. Din păcate, nu ne stă în putere să cunoaștem toate încercările de a defini un polinom cu un nume similar.

Numărând numărul de circuit al unui graf G , $n(G - Cy_m; k)$, prin intermediul CoP general (Ecuația 0), se poate defini numărul de structuri Kekulé din subgraful $G - Cy_m$ obținute după eliminarea circuitelor conjugate deconectate, precum în ecuația 17 [196,306]:

$$CyP_G = \sum_{m>0} \sum_{k=0}^L n(G - Cy_m; k) \cdot x_m^k \quad (17)$$

unde m reprezintă dimensiunea circuitelor (1 pentru circuite cu 6 atomi, 2 – 10, 3 – 14), k numărul de circuite conjugate deconectate eliminate, n structurile Kekulé rămase, iar Cy_m se referă la dimensiunea circuitelor eliminate.

Folosind exemplul anterior, antracenu, G_9 (în **Figura III.18 (a)**):

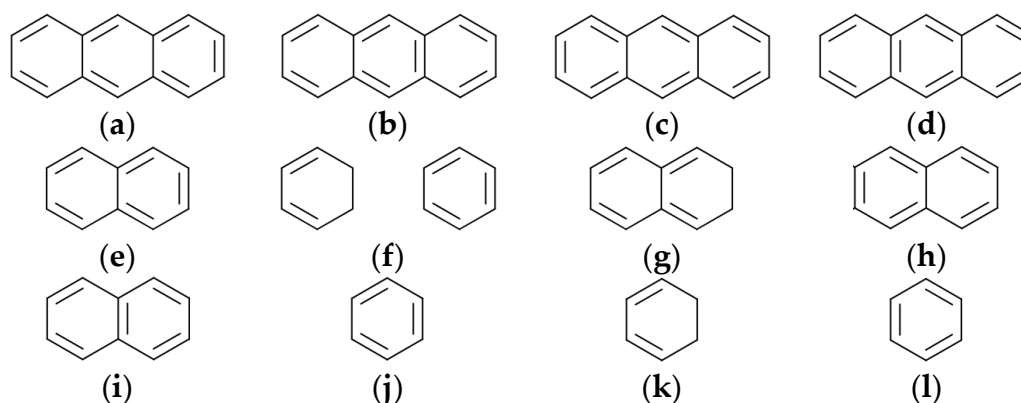


Figura III.18. (a) antracen G_9 ; (a–d) structuri Kekulé ale antracenui; (e–g) ce rămâne după eliminarea *unui* inel din (a); (e, h, i) Structuri Kekulé ale naftalinei; (j, k) ce rămâne după eliminarea unui inel din (e); (j, l) Structurile Kekulé ale benzenului.

pentru orice $m \geq 0$ și $k = 0$, nu se elimină inelele și se rămâne cu $n(G-Cy_m; k=0) = 4$ structuri Kekulé (Figura III.18 (a – d)) = $SP_{x=1}$ (polinomul sextet pentru $x = 1$ [171,196]) ;

pentru $m \geq 0$ și $k > 1$, nu se poate găsi mai mult de un inel conjugat deconectat în graful G , prin urmare, rămâne $k = 1$ și se descriu cazurile în care $m = 1, 2$ și 3 ;

pentru $m = 1$ și $k = 1$, $n(G - Cy_1; 1) = 3$ structuri Kekulé; din **Figura III.18 (a)** eliminăm un inel, obținem **Figura III.18 (e)** și **(g)**, și rămânem cu naftalina **Figura III.18 (e)** ale cărei structuri Kekulé sunt **Figura III.18 (e, h, i)** [306]; în **Figura III.18 (f)** rămânem cu două structuri separate, deci $n = 0$;

pentru $m = 2$ și $k = 1$, $n(G - Cy_2; 1) = 2$ Structuri Kekulé; din **Figura III.18 (j, k)** rămânem cu benzenul **Figura III.18 (j)** ale cărui structuri Kekulé sunt **Figura III.18 (j, l)**;

pentru $m = 3$ și $k = 1$, $n(G - Cy_3; 1) = 1$, deoarece rămânem cu graful gol după eliminarea inelului cu 14 atomi.

Ca atare, $CyP_{G_9} = 4 + 3 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 + x_3$.

Ar fi util să se găsească un polinom care să enumere și alte inele, nu doar cu 6, 10 și 14 atomi. Există un polinom de circuit mai vechi, înrudit prin nume [287,297,307,308].

III.18. Polinomul cromatic

George David Birkhoff a definit polinoamele cromatice (notate în recenzia noastră *ChrP*) în 1912 [309]. Coeficienții săi iau în considerare colorările stricte [307]. Un calculator de polinoame cromatice este disponibil în [310].

Colorarea unui graf este strâns legată de mulțimea independentă. O colorare proprie înseamnă că nu există două vârfuri adiacente care să aibă aceeași culoare. De obicei, termenul „propriu” nu poate fi menționat. Culorile pot fi de fapt alte etichete, cum ar fi numere întregi sau elemente chimice.

Unele proprietăți sunt importante pentru aceste polinoame: numărul cromatic = numărul minim de culori necesar este de obicei notat cu χ ; numărul de independență = dimen-

siunea maximă a unei mulțimi independente este de obicei notat cu α . Un graf cu n atomi și fără muchii are $\chi = 1$ și $\alpha = n$, în timp ce un graf complet are $\chi = n$ și $\alpha = 1$.

O condiție necesară și suficientă pentru o colorare corectă a grafului G este $k \geq \chi(G)$, unde k este numărul de culori utilizate. Culorile pot simboliza liganzi care pot fi substituiți pentru a evita adiacența a doi liganzi identici/similari. Rădăcinile polinomului cromatic pot poseda informații construcționale, de exemplu existența unor căi hamiltoniene [307].

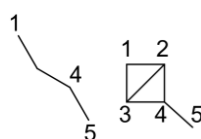
Pornind de la CoP general (ecuația 0), se poate defini n_k numărul de moduri posibile în care k culori pot fi utilizate într-o moleculă astfel încât niciun atom (vârf) legat (adiacent) să nu aibă aceeași culoare, precum în ecuația 18.1:

$$ChrP_G = \sum_{k \geq 0} n_k(x) \quad (18.1)$$

Luând ca exemplu metil-ciclobutanul (**Figura III.17 (a)**), putem începe prin a alege x culori pentru atomul 5 ($x \cdot \dots$). Pentru fiecare dintre aceste cazuri, ne rămân $x-1$ culori din care să alegem pentru atomul 4 ($x \cdot (x-1)\dots$).

Acum avem două tipuri de cazuri ($x \cdot (x-1) \cdot [i+ii]$) (așa cum se poate observa în **Figura III.19**): cazul i – atomii 2 și 3 au aceeași culoare și le putem atribui culori ($x-1$); sau cazul ii – au culori diferite și putem găsi posibilități ($x-1$) \cdot ($x-2$).

$$\begin{cases} i = (x-1)\dots \\ ii = (x-1) \cdot (x-2)\dots \end{cases} \quad (18.2)$$



(a) (b)

Figura III.19 (a) caz i ; **(b)** cazul ii.

Este util să vizualizăm aceste cazuri dintr-un alt punct de vedere, un algoritm de contracție/legare: cazul i - atomii 2 și 3 devin unul, se contractă - aceasta poate fi scrisă ca $G_i = G_1/(2; 3)$, deoarece atomii 2 și 3 nu mai există; cazul ii - $G_i = G_1 + (2,3)$, atomii 2 și 3 sunt legați, iar (2,3) este o nouă legătură (margină, muchie).

Continuând cazul i - atomul 1 poate avea $(x-1)$ culori, înlocuind punctele din prima egalitate din ecuația 18.2, $i = (x-1) \cdot (x-1)$; iar în cazul ii - doar $(x-2)$ culori, înlocuind punctele din a doua egalitate din ecuația 18.2, $ii = (x-1) \cdot (x-2) \cdot (x-2)$.

$$\text{Ca atare, } ChrP_{G_1} = x \cdot (x-1) \cdot [(x-1) \cdot ((x-1) + (x-1) \cdot (x-2) \cdot (x-2))] = x^5 - 5 \cdot x^4 + 10 \cdot x^3 - 9 \cdot x^2 + 3 \cdot x.$$

Polinomul cromatic pentru anumite clase de grafuri poate fi obținut din polinomul de potrivire cu unele substituții [311].

O generalizare a polinomului cromatic este polinomul Tutte [312].

III.19. Polinomul Tutte

Inițial, polinomul dicromatic [313], polinomul Tutte (notat aici ca TP) este un invariant de izomorfism al grafurilor care generalizează polinoamele cromatice și de flux [314]. Este înrudit cu un polinom B (bloc) și descris în [312,315–317]. Polinomul este bine contextualizat în literatura recentă. O istorie a omului de știință Tutte poate fi găsită în [318].

Acest polinom poate fi definit prin următoarele relații [319]:

$$TP_G(x, y) = \begin{cases} xT_{G/e}(x; y) & \text{dacă } e \text{ este un pod} \\ yT_{G-e}(x; y) & \text{dacă } e \text{ este o buclă} \\ T_{G-e}(x; y) + T_{G/e}(x; y) & \text{dacă } e \text{ este o muchie ordinară} \end{cases}$$

Un exemplu de calcul al TP poate fi definit prin recursivitate liniară: ștergerea și contractarea legăturilor ordinare (muchiiilor). Ajungem la arbori și bucle, așa cum se vede în **Figura III.20**.

$$TP(G_1; x, y) = TP(G_1 \setminus b; x, y) + TP(G_1/b; x, y).$$

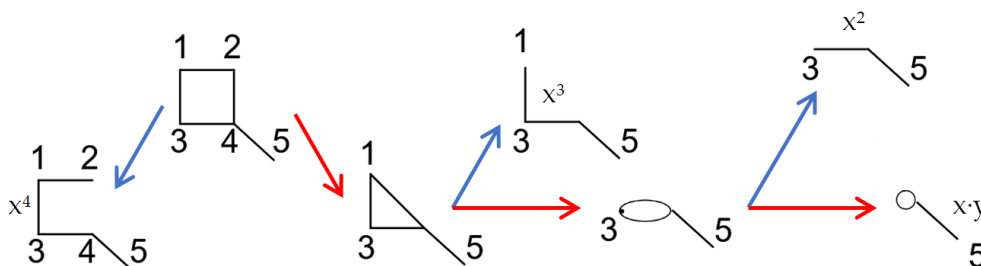


Figura III.20. Exemplu de ștergere și contractare a muchiiilor obișnuite pentru G_1 (săgeata albastră este pentru ștergere; roșie este pentru contractie).

Prima legătură ștearsă produce un graf cu 4 segmente, scris ca x^4 , iar prin contractie ajungem la un graf non-elementar (atomii 2 și 4 devin unul). Acesta din urmă suferă din nou o schemă de ștergere/contractie și obținem x^4 și un alt graf non-elementar (atomii 1, 2 și 4 devin unul și arată ca o legătură dublă între acest grup și atomul 3). În cele din urmă ajungem la x^4 și un graf format dintr-o legătură simplă (x) și o buclă simplă (y), notat cu $x \cdot y$.

Björklund și colaboratorii au dezvoltat un algoritm mai rapid care calculează polinomul Tutte și alți invarianti ai unui graf arbitrar în timp, în limita unui factor polinomial al numărului de mulțimi de vârfuri conectate. Algoritmul evaluează o generalizare multivariată a polinomului utilizând o identitate datorată lui Fortuin și Kasteleyn. [320].

Fath-Tabar și colaboratorii au prezentat o formulă simplă pentru calcularea polinomului Tutte al unui lanț benzenoid [321]. Szu și Dai au calculat polinoame Tutte și au obținut unele caracteristici numerice pentru unele benzodiazepine [322]. Gong și colaboratorii au obținut o expresie explicită pentru polinomul Tutte al sistemelor benzenoide cu un hexagon ramificat și numărul de arbori de acoperire [323,324]. Ren și colaboratorii introduc un vector de graf la o muchie dată legat de polinomul Tutte, au utilizat matrici de transfer de trei clase, au obținut formula de reducere pentru polinomul Tutte și numărul de arbori de acoperire ai oricărui sistem benzenoid cata-condensat [325]. Ma și colaboratorii au obținut polinoamele Tutte ale grafurilor evantai prin funcții generatoare [326].

Chen și Guo au considerat câteva cazuri speciale de lanțuri policiclice alternante și au folosit polinomul Tutte pentru a obține o formulă închisă explicită a numărului de arbori de acoperire, a numărului de păduri de acoperire și a numărului de subgrafuri conectate la acoperire ale derivaților [327].

Chbili și colaboratorii au demonstrat că pentru polinomul Tutte al unui graf, coeficienții lui îndeplinesc anumite condiții, dacă grupul de automorfism al grafului conține un element de ordin prim p [314].

Chen și Li oferă o metodă mai simplă și mai eficientă pentru a obține polinoamele Tutte ale lanțurilor policiclice alternante, pentru a obține expresiile explicite pentru aceste polinoame și numărul de arbori de acoperire ai sistemelor fenilenice cu un număr dat de hexagoane ramificate, pentru a determina valorile extreme ale numărului de arbori de acoperire dintre sistemele fenilenice și pentru a caracteriza aceste sisteme fenilenice [328].

Chen derivă polinoamele Tutte pentru rețele moleculare de silicați și sisteme benzenoide, precum și formule exacte, expresii analitice explicite în formă închisă pentru numărul de arbori de acoperire, subgrafuri de acoperire conectate, păduri de acoperire și orientări aciclice printr-o tehnică de descompunere combinatorială. Se afirmă că entropia arborelui de acoperire este un parametru de măsură important pentru o anumită proprietate topologică a unui graf [329].

Awan și Bernardi au generalizat polinomul Tutte pentru grafuri orientate la polinomul B [298].

III.20. Alte polinoame

Polinomul informațional

A fost propus polinomul informațional al unui graf, [330]. Pe scurt, pentru calcularea acestui polinom trebuie înlocuită matricea de adiacență cu una nouă:

$$A_{PD} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & a_{1,j} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i,1} & \cdots & a_{i,j} & \cdots & a_{i,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,j} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (20.1)$$

cu $a_{ii} = 1$ și

$$a_{i,j} = 1 - \frac{|f(i) - f(j)|}{2^{d(i,j)} \cdot \sum_{i=1}^n f(i)} \quad (20.2)$$

unde d este distanța topologică clasică care operează pe etichetele de vârf și $f(i) = \sum_{k=1}^{\rho} c_k \cdot |S_k(i)|$, unde ρ este diametrul grafului, S mulțimea care conține vârfurile aflate la distanța k față de i , $|S_k(i)|$ dimensiunea acelei mulțimi și c o matrice cu ponderi arbitrare (setate la $c_1 = 0,4$, $c_2 = 0,3$, $c_3 = 0,2$, $c_4 = 0,1$ și $c_k = 0$ pentru $k > 4$ în [330], sau $c_1 = 4$, $c_2 = 3$, $c_3 = 2$, $c_4 = 1$ și $c_k = 0$ pentru $k > 4$ în ecuația 20.2, este aceeași în termenii ecuației 20.1, rescrisă ca „ $a_{i,j}$ ” mai sus).

Și definiția sa $IP(G, A_{PD}, x) = \det(A_{PD} - x \cdot E)$, unde E este entropia topologiei grafului subiacent. Conținutul informațional structural este definit și interpretat ca entropia topologiei grafului subiacent.

Polinomul orbital

Dehmer și coautorii au venit cu un termen, polinomul orbital [331], pentru a defini o serie de forma $\sum_{k=1}^{\mathcal{E}} c_k x^k$, unde c_k este numărul grupului de automorfism al lui G de dimensiune k și \mathcal{E} este dimensiunea orbitei (orbitelor) de cea mai mare dimensiune. Pentru P_n (Figura III.21), o cale ramificată cu n vârfuri, polinomul orbital este :

$$O_{DM}(P_n; x) = \begin{cases} \frac{n}{2} \cdot x^2 & , \quad \text{pentru } n \text{ par} \\ \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor - 1\right) \cdot x^2 + x & , \quad \text{altfel} \end{cases}$$

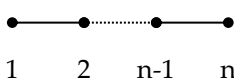


Figura III.21. Graful traseului, P_n .

Se afirmă că simetria moleculară și atomii sau legăturile echivalente topologic sunt importante în interpretarea spectrelor RMN, planificarea automată a sintezei și pentru generarea de izomeri.

Polinomul B

Polinomul bloc (B sau BP) a fost introdus de Farrell și Rosenfeld în timp ce studiau proprietățile spectrale ale grafurilor cu puncte de articulație [311].

În contextul acoperirilor (ale FP), dacă fiecare membru care nu este un nod constă dintr-un singur bloc, numim clasa de polinoame F corespunzătoare, aceasta se poate numi și clasa de polinoame B . Dacă F este o familie de cicluri, atunci fiecare membru care nu este un nod al lui F este un bloc (se aplică și clicilor). Toate polinoamele de circuit speciale (MP , ChP și π) sunt polinoame B . Stelele și căile nu sunt blocuri și nu dau naștere la polinoame B [297].

Studii suplimentare au fost propuse pentru toate tipurile posibile de polinoame ale dendrimerilor (spectre și valori proprii), pentru a încerca să prezică proprietățile termodinamice [332].

Polinomul de acoperire Clar

Polinomul de acoperire Clar este introdus în [296]. Se arată cum se obține numărul de sexteturi aromatice, numărul de structuri Kekulé și primul număr Herndon din polinom.

Zhang a obținut diferența polinoamelor de acoperire Clar pentru izomerii S,T [333]. Ulterior, a stabilit o relație între polinomul de acoperire Clar și polinoamele cromatice ale sistemelor hexagonale [334].

Zhang și colaboratorii arată cum se poate obține o precizie mai bună folosind acest polinom pentru calculul energiei de rezonanță a hidrocarburilor aromatice condensate [335].

Witek și Kang prezintă aceste polinoame pentru izomerii (5,6) ai fullerenei C_{20-50} . Pentru benzo[e]piren, decodează cei mai importanți invarianți topologici [336].

Li și colaboratorii au propus un algoritm Matlab pentru acest polinom pentru orice lanț dublu hexagonal. Energia de rezonanță topologică este liniar legată de logaritmul său natural. [337].

Polinoame de forțare și anti-forțare

Klein și Rosenfeld aduc la viață o serie de discuții despre forțare, libertate și unicitate în teoria grafurilor chimice. Această idee generală de forțare are multe puncte în comun cu noțiunea generală de „filtre” din topologie [338].

Zhao și Zhang au propus polinoamele într-o serie de manuscrise. Primul numără potrivirile perfecte cu același număr de forțare pentru paralelogramul benzenoid și benzenoizii săi înrudiți [339]. Ei demonstrează că spectrul anti-forțare al oricărui sistem hexagonal cata-condensat este continuu [340]. Ulterior, obțin o relație de recurență a polinomului anti-forțare al sistemelor benzenoide cu muchii de forțare [341]. Apoi, se concentrează pe grilele $2 \times n$ și $3 \times 2n$ și obțin expresiile explicite ale polinoamelor și spectrelor lor de forțare și anti-forțare [342]. Zhao a dedus formule de recurență ale polinoamelor de forțare pentru sisteme hexagonale constructibile monotone și sisteme hexagonale constructibile cu o singură rotire [343]. El a derivat o relație de recurență a polinomului de forțare pentru lanțuri hexagonale dublu [344]. Cel mai recent, a derivat o relație de recurență a polinomului anti-forțare pentru sisteme hexagonale cata-condensate [345].

Deng și colaboratorii au obținut expresiile explicite ale polinoamelor de forțare și anti-forțare ale unui sistem de pirene [346]. Deng și colaboratorii au calculat polinoamele de forțare și anti-forțare ale unui tip de graf [347].

Mai multe polinoame au fost căutate de Randić: invarianți structurali și reamintim câteva dintre aceste polinoame: Altenburg, de distanță, terminale, bipartite sau viciiale [286].

IV. Polinomul caracteristic în căutarea de similitudini⁴

Găsirea tiparelor este la fel de ușoară ca și vizualizarea a două structuri de bază care sunt similare. În timp ce similitudinea este convenabilă pentru oameni, trebuie măsurată pentru a putea conduce procesele decizionale autonome ale unui PC. Bazele de date cu baterii, dintre care una conține peste 17000 de substanțe chimice unice [349,350], conțin volume de date cu multe ordine de mărime mai mari decât poate compara ochiul uman. Datorită volumului, unele programe necesită zile pentru a explora anumite baze de date pentru o interogare. Este posibil să se ajungă la un timp mai rezonabil prin crearea de noi algoritmi [351]. Selectarea alinierii cu cea mai mare similitudine geometrică este un proces mai simplu comparativ cu evaluarea semnificației sale chimice [352]. Urmărirea uneia dintre „cele mai bune metode” este în progrese cu mai multe programe create de-a lungul ultimelor decenii:

⁴ Joița, D.-M.; Tomescu, M. A.; Bălint, D.; Jäntschi, L. [348].

- CAB-Align utilizează zona de contact reziduu-reziduu pentru a identifica regiunile de similitudine [353];
- Caretta folosește tehnica rotație-invariantă – semnale ale distanțelor derivate din suprapunere întinderi contigue de reziduuri pentru a găsi o suprapunere inițială [354];
- DALI [355];
- LS-align generează aliniamente structurale rapide și precise la nivel de atom ale moleculelor de ligand printr-o căutare euristică iterativă a funcției țintă care combină comparații ale distanței inter-atomi cu masa și legătura chimică [356];
- MATT utilizează o abordare bazată pe fragmente care permite flexibilitate locală între perechile de fragmente din două structuri de intrare și apoi un algoritm de programare dinamică pentru a asambla aceste perechi intermediare [357];
- TM-align folosește scorul TM independent de lungime ca măsură a similitudinii între două proteine într-o abordare de programare dinamică [358].

Reimplementarea paralelă a mTM-align/TM-align pm-TM-align [359], parMATT [360], algoritmi euristici și organizarea ierarhică mTM-align [361], sunt doar un număr a progreselor acestor algoritmi.

Pentru a reduce distanța dintre site-urile echivalente din molecule, versiunea 3D a metodei de aliniere a matricei de distanță (DALI) folosește translația și rotația [362].

Problema valorilor proprii poate fi utilizată pentru a minimiza numărul de rotații pentru care o funcție de scor trebuie să ruleze pentru a obține alinierea corectă sau oglinda acesteia [363]. Problema proprie este definită în literatură astfel:

Având matricea pătratică A , de ordinul n , $\lambda \in \mathbb{C}$ se numește valoarea proprie a matricei A și vectorul propriu asociat $X \neq 0$ acesteia dacă se satisface relația $AX = \lambda X$. Matricea $\lambda I - A$ este singulară (deoarece $\det(\lambda I - A) = 0$), unde I este matricea de identitate de ordinul n . Soluțiile ecuației $\det(xI - A) = 0$ reprezintă valorile proprii ale matricei A .

Dezvoltarea determinantului $\det(\lambda I - A)$ se numește polinomul caracteristic (ChP) asociat matricei A . Are gradul egal cu ordinul matricei, astfel încât valorile proprii ale matricei A sunt rădăcinile acesteia.

Problema valorilor proprii în legătură cu alinierea geometrică a fost enunțată anterior în contextul analizei suprafeței [364] și al controlului și poate merge într-o altă direcție în contextul compușilor utilizați în sistemele de stocare a energiei. Un subiect al studiului este o soluție la problema proprie a unor astfel de compuși care sunt aliniați. Sistemul cartezian este rotit și în cele din urmă translat și reflectat până când structura ajunge într-o poziție caracterizată de cele mai mari valori absolute ale valorilor proprii observate pe coordonatele carteziane. Scopul acestui studiu este de a găsi cea mai bună aliniere a multor compuși unul față de celălalt. O extensie a studiului anterior descris de Jäntschi [363] a fost elaborată.

În [363] s-a arătat că matricea de distanță carteziană este antisimetrică și, prin urmare, valorile sale proprii sunt pur imaginare, precum și faptul că cea mai bună aliniere a unei molecule se obține pentru valoarea minimă a sumei pătratele valorilor proprii ale matricei distanțelor carteziane.

Astfel, unghiul de rotație al structurii trebuie găsit în jurul unei axe pentru care se obține minimul acestei cantități. O metodă de a găsi unghiul de rotație în jurul unei axe pentru cea mai bună aliniere este următoarea: în cazul unui compus cu 5 atomi, vom nota vârfurile grafului corespunzătoare compusului cu $V_i(x_i, y_i, z_i)$, $i = \overline{1,5}$. Se găsește unghiul optim de rotație în jurul axei Oz (de exemplu). Polinomul caracteristic asociat matricei de distanțe carteziane pe Ox poate fi aproximat astfel:

$$ChP(\lambda, Dx) = \lambda^3 \left[\lambda^2 + \sum_{\substack{j=1 \\ i=j+1}}^{n-1} (x_i - x_j)^2 \right],$$

cea ce duce la problema găsirii unghiului de rotație în planul xOy astfel încât să se obțină valoarea maximă a sumei:

$$S_x = \sum_{\substack{j=1 \\ i=j+1}}^{n-1} (x_i - x_j)^2.$$

Deoarece termenul $(x_i - x_j)^2$ devine maxim atunci când $\alpha(V_j V_i, Ox) = 0$, vom calcula suma S_x folosind legea mișcării a rotației unui corp în jurul unei axe fixe:

$$\begin{cases} x'_i = x_i \cos \varphi - y_i \sin \varphi \\ y'_i = x_i \sin \varphi + y_i \cos \varphi \end{cases}$$

unde φ va lua pe rând $\alpha(V_j V_i, Ox)$; $j = \overline{1, n-1}$; $i = j + 1$ valoarea .

Prin interpolare, se găsește valoarea unghiului de rotație în jurul axei Oz și în jurul uneia dintre celelalte axe. Valorile proprii ale matricei de distanță de coordonate carteziane asociate Dx sunt întotdeauna două soluții pur imaginare conjugate : $\lambda_1^2 = \lambda_2^2 = -S_x$.

Sumele de forma $S_T = -2S_x - 2S_y - 2S_z$, asociate cu matricele Dx, Dy, și Dz, sunt comparate pentru a găsi similitudini. O aplicație a acestei abordări poate începe prin a găsi ChP pentru matrice de distanță de coordonate carteziane. Acestea sunt utilizate pentru a defini minimele sumelor pătratelor valorilor proprii (S_x , S_y și S_z) pentru aceste matrici.

Următoarele trei **Tabele IV.4-6** descriu matricele de distanță de coordonate carteziane aproximative pentru atomii de SrTriO₃5229. Ele sunt antisimetrice, astfel încât valorile lor proprii, în **Tabelul IV.7**, vor fi imaginare.

Dx	1	2	3	4	5
1	0	0,00009	-1,38326	-0,000003	1,38344
2	-0,00009	0	-1,38335	-0,00009	1,38335
3	1,38326	1,38335	0	1,38326	2,7667
4	0,000003	0,00009	-1,38326	0	1,38344
5	-1,38344	-1,38335	-2,7667	-1,38344	0

Tabelul IV.4. Prima matrice de distanță a coordonatei carteziane „x” pentru SrTiO₃5229.

Dy	1	2	3	4	5
1	0	-0.000000006	0.79873	-1.59735	0.79862
2	0.000000006	0	0.79873	-1.59735	0.79862
3	-0.79873	-0.79873	0	-2.39608	-0.00011
4	1.59735	1.59735	2.39608	0	2.39598
5	-0.79862	-0.79862	0.00011	-2.39598	0

Tabelul IV.5. A doua matrice de distanță a coordonatei carteziene „y” pentru SrTiO₃5229.

Dz	1	2	3	4	5
1	0	-3.3885	-2.25903	-2.259	-2.25896
2	3.3885	0	1.12946	1.1295	1.12953
3	2.25903	-1.12946	0	0.00004	0.00007
4	2.259	-1.1295	-0.00004	0	0.00004
5	2.25896	-1.12953	-0.00007	-0.00004	0

Tabelul IV.6. A treia matrice de distanță a coordonatei carteziene „z” pentru SrTiO₃5229.

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
[Dx]	4,37453i	-4,37453i	0	0	0
[Dy]	4,37453i	-4,37453i	0	0	0
[Dz]	5,5334i	-5,5334i	0	0	0

Tabelul IV.7. Valori proprii pentru SrTiO₃5229.

Matricea(A)	Polinomul $ \lambda \cdot I - A $
[Dx]	$\lambda^3 \cdot (\lambda^2 + 19,13653)$
[Dy]	$\lambda^3 \cdot (\lambda^2 + 19,13653)$
[Dz]	$\lambda^3 \cdot (\lambda^2 + 30,61844)$

Tabelul IV.8. Polinoamele caracteristice ale [Dx], [Dy] și [Dz] pentru SrTiO₃5229.

Se poate observa că, spre deosebire de valorile proprii pentru o matrice simetrică, obținem o singură pereche de numere imaginare complementare, indiferent de numărul de atomi din compus. O altă parte bună a acestei abordări, **Tabelul IV.8**, polinomul poate fi exprimat folosind coeficienți de valoare reală ca produs al unui polinom de grad 2 și al unui monom de grad (n - 2), conducând la un răspuns mai rapid din partea programului.

Candidații sunt structuri lipsite de un număr de atomi în scopul găsirii unei supra-puneri cu scor mai mare. Lipsirea de atomi este nediscriminatorie, de tip combinatorică.

Folosind abordarea problemei proprii (denumită ca funcție „OrigEig” în codul disponibil în [348]), ceilalți candidați sunt aliniați la SrTiO₃5229. Candidații cu un număr mai mic de atomi decât originalul sunt procesați în timp ce se caută similitudini de valori proprii. Restul atomilor sunt adăugați ulterior folosind un algoritm de trilaterare găsit și folosit din literatură [365]. Au fost adăugate unele capabilități, cum ar fi importarea datelor originale (fișiere cu extensia „*.sdf” sau „*.xyz” prin funcția „impCart”), „*.sdf” în „*.xyz” conversie fișier (pentru structuri organice, eliminând atomii de hidrogen pentru comoditate), exportând toate structurile rotite comparate ca „*.xyz” (prin funcția „writerxyz”), o funcție de scor bazată pe scorul TM și crearea „*.xls”. O schemă a codului urmează în **Figura IV.1**.

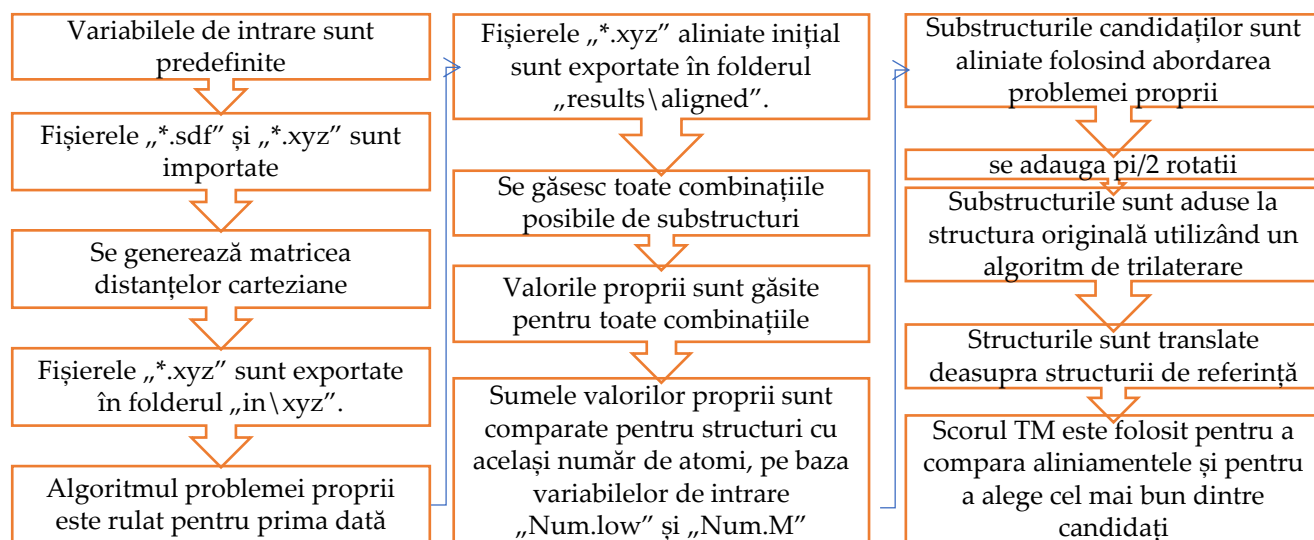


Figura IV.1 O prezentare schematică a algoritmului.

Valorile proprii ale tuturor combinațiilor de atomi sunt calculate pentru fiecare structură. S_x , S_y și S_z ale matricelor D_x , D_y și D_z pentru SrTiO_3 5229 aliniat sunt -45,928, -45,928 și respectiv -45,928; suma este -137,784.

Comparând Ta_2O_5 1238961 cu SrTiO_3 5229, pot fi găsite 21 de combinații posibile de 5 atomi (sumele lor proprii sunt prezentate în **Tabelul IV.9**), dar o combinație de 4 atomi este o potrivire mai apropiată (prezentată în **Tabelele IV.10-12**).

	$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$
1	-307,5042	4	-206,3409	7	-290,7693	10	-206,3411	13	-189,0737	16	-225,5829	19	-193,1574
2	-261,1036	5	-242,4953	8	-261,1036	11	-336,4603	14	-225,5830	17	-189,0739	20	-267,8521
3	-290,7693	6	-336,4603	9	-242,4951	12	-259,1272	15	-319,3706	18	-319,3706	21	-267,8523

Tabelul IV.9. Sume de valori proprii a 21 de combinații de 5 atomi pentru Ta_2O_5 1238961.

	$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$		$S_x + S_y + S_z$
1	-194,5721	6	-171,1067	11	-137,5761	16	-171,1067	21	-71,75625	26	-113,9332	31	-177,3704
2	-194,5721	7	-71,75610	12	-231,1220	17	-137,5760	22	-201,4564	27	-113,9333	32	-103,0947
3	-146,6665	8	-144,4196	13	-112,3626	18	-137,9311	23	-112,3626	28	-207,3018	33	-177,3704
4	-146,6667	9	-201,4564	14	-150,3065	19	-231,1220	24	-186,4607	29	-103,0947	34	-140,8613
5	-240,0351	10	-137,9309	15	-186,4609	20	-144,4195	25	-150,3067	30	-140,8612	35	-148,5577

Tabelul IV.10. Sume de valori proprii ale combinațiilor de 4 atomi pentru Ta_2O_5 1238961.

	$S_x + S_y + S_z$
1	-68,8915
2	-91,8553
3	-84.2007
4	-84.2007
5	-84.2007

Tabelul IV. 11. Sume de valori proprii ale combinațiilor de 4 atomi pentru SrTiO_3 5229.

Funcția „moreData” analizează fiecare potențial candidat pentru a-i găsi pe cei mai buni, cu cea mai mică diferență între $S_x + S_y + S_z$ sume. „Num.low” definește diferența procentuală dorită. Multiplicatorul „Num.M” este implementat pentru a mări intervalul de căutare în detrimentul timpului, deoarece cel mai bun candidat poate să nu fie întotdeauna cel cu cea mai mică diferență între sume. În acest caz putem observa în **Tabelele IV.9-11** că sumele combinațiilor de 5 atomi colorate în albastru de Ta_2O_5 1238961 sunt departe de suma valorilor

propriu a SrTiO₃ 5229; există două posibilități cu sume mai apropiate pentru combinații de 4 atomi colorate în portocaliu; și două colorate în roșu care sunt cele mai apropiate. Acest aspect este prezentat în **Tabelul IV.12**:

Ta ₂ O ₅ 1238961				Diferență		SrTiO ₃ 5229					
atomi				sumă	%	sumă	atomi				
-	Ta2	-	O4 - O6 O7	-71,7561	3,9921	-68,8915	-	Ti2	O3	O4	O5
Ta1	-	O3	- O5 - O7	-71,7563	3,9923	-68,8915	-	Ti2	O3	O4	O5
Ta1	Ta2	-	O4 - - O7	-103,0947	10,9020	-91,8553	Sr1	-	O3	O4	O5
Ta1	Ta2	O3	- - - O7	-103,0947	10,9020	-91,8553	Sr1	-	O3	O4	O5
Ta1	Ta2	-	O4 - O6 O7	-189,0737	27,1268	-137,7840	Sr1	Ti2	O3	O4	O5
Ta1	Ta2	O3	- O5 - O7	-189,0739	27,1269	-137,7840	Sr1	Ti2	O3	O4	O5

Tabelul IV.12. Atomi selectați ai Ta₂O₅ 1238961 aliniați la SrTiO₃ 5229, sume de valori proprii ale candidaților și diferență procentuală de sume de valori proprii.

În **Tabelul IV.12** se poate observa că există o diferență la a 4-a cifră după virgulă. Din acest motiv, patru cifre vor fi folosite după virgulă în toate tabelele pentru rezultatele de similitudine geometrică. Pe candidații selectați, se aplică tehnica problemei proprii pentru a obține o aliniere de rotație în funcție de valoarea proprie. Compușii se presupune că se obțin în imaginea în oglindă a alinierii corecte sau în alinierea lor corectă [363]. Prin utilizarea primei instrucțiuni „for” a funcției „align”, căutarea este extinsă pentru a include aceste potențiale rotații favorabile. O procedură de trilaterare (primirea datelor de la restul funcției de „alinieră”) este găsită și utilizată din literatură pentru a determina poziția celorlalți atomi nepotriviți, nealiniați [365].

Deoarece una dintre aceste rotații ar trebui să conducă la o bună suprapunere a celor doi compuși, valorile medii pe fiecare dintre axe sunt găsite pentru atomii selectați din ambele structuri. Selecția se face pe baza atomilor indexați în căutarea de candidat prezentată în **Tabelul IV.12**. Scăzând pentru fiecare dintre axe, structura candidată este translatată deasupra SrTiO₃ 5229 (prin funcția „trans”).

Distanțele dintre perechile de atomi multipli sunt găsite pentru combinațiile candidate rezultate. Atomii care vor fi suprapuși pe baza unei probleme de atribuire liniară care permite soluții cu cost minim sunt găsiți folosind funcția Matlab „matChPairs”. Aceste perechi sunt introduse într-un sistem de notare care este selectat din literatură; în acest exemplu, este componenta geometrică [366]. Toate acestea sunt realizate de funcția „alegere”. Deoarece nu sunt mulți atomi în structurile pe care le-am ales, o ajustare: am făcut o ajustare, scăderea „15” este schimbată la zero pentru a obține o distanță pozitivă sub rădăcina pătrată a factorului de scalare empiric pentru distanță. normalizare sau „d0”. Acest lucru este modificabil în „empi3”. Ar putea fi utilizate mecanisme suplimentare de notare. Cel mai bun rezultat este suprapus în **Figura IV.2**.

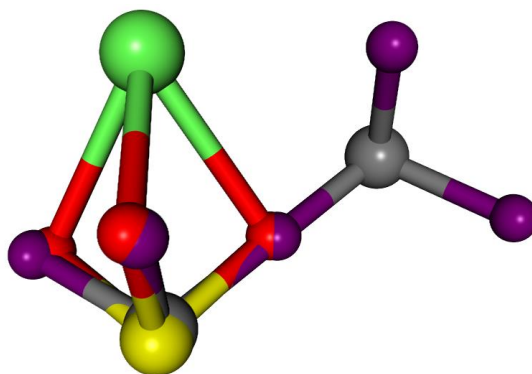


Figura IV.2. Vedere 3D a celei mai bune alinieri a Ta₂O₅ 1238961 (Ta gri; O violet) la SrTiO₃ 5229 (Sr verde; Ti galben; O roșu).

Scorurile care sunt apropiate sunt adăugate folosind parametrul „Num.low2”. Tabelul afișează elementele care au fost alese pentru alinierea candidat-candidat, deoarece facilitează selectarea dintre scorurile care sunt apropiate unul de celălalt. Un fișier „*Tscore.xls” este produs după finalizarea funcției „choice”.

Algoritmii valorii proprii poate alege dintre toți candidații utilizând funcția TMscore. În articolul publicat au fost aliniați aminoacizii, iar în această teză sunt aliniați și prezentați compușii utilizați în sistemele de stocare a energiei.

După cum s-a menționat anterior, este inclus un parametru pentru a se asigura că sunt luate în considerare scorurile apropiate. În acest caz, este permis un scor de rezultat de 80% din maxim. „Num.low2” modifică această proporție. Acest lucru este necesar pentru a asigura că cea mai bună aliniere este inclusă în rezultate undeva, chiar dacă nu este alinierea cu cel mai mare scor TM.

Elementele sunt afișate pentru a le selecta cu ușurință și a elimina concurenții ce pot avea scoruri numerice similare, dar elementul incorect. Rezultate și mai bune ar putea fi obținute prin utilizarea unei combinații a acestor metode sau a sistemelor alternative de notare.

Aplicarea și utilizarea problemei proprii se extinde dincolo de alinierea moleculară [363] și similitudinea biologică, inclusiv analiza grafurilor obișnuite pentru proprietățile lor, inclusiv spectre proprii și auto-morfisme [367], topologia moleculară [368–371], ecuații caracteristice [372], descompunerea componentelor principale [373], topologia algebrică și curbele Bertrand generalizate [374], tratarea deciziei fuzzy [375] și matricelor tridiagonale [376], tabele de comutatoare [377], Laplacian [378], sisteme de diferențial [379] și ecuațiile integro-diferențiale [380], în timp ce problemele provocatoare apar în evaluarea rădăcinilor polinoamelor [381] și ecuația caracteristică a unei matrice pătrate de ordin mare [382].

Ar putea fi remarcat că alinierea optimă sfidează tendințele riguroase. Este posibil să luăm în considerare rezultatele de similitudine apropiată ale aceluiași algoritm. Putem concluda că alinierea cu cel mai mare scor nu este întotdeauna alinierea optimă din punct de vedere chimic, chiar și după utilizarea unui sistem de evaluare. Algoritmii curent trebuie limitați de câțiva parametri pentru a scădea numărul de rotații pe care trebuie să le efectueze o

funcție de scoring. În plus, combinarea mai multor strategii poate oferi rezultate mai rapid. O bază de date cuprinzătoare ar demonstra un proces rațional de selectare a acestora.

Pentru a atenua efectele formei funcționale fixe inspirate de teorie și ale capacităților de descriere restrânse, învățarea automată trebuie încorporată în funcțiile de scor. Aceste defecte pot fi remediate permițând învățării automate să capteze proprietăți care sunt greu de prezis din cauza numeroaselor relații cantitative structură-activitate (QSAR) nemăsurate, necunoscute sau nedescoperite, mai degrabă decât aplicarea unei abordări rigide. Cantitatea în creștere rapidă de date structurale și de interacțiuni de înaltă calitate disponibile în literatură poate fi asimilată folosind învățarea automată. S-a dezvoltat un program adresat căutărilor ce va trebui extins în acest sens. Principala problemă a codului din 2021 a fost că matricele nu au fost prealocate. Aceasta a însemnat că programul a trebuit să mărească dimensiunea matricei pentru fiecare pas din buclele „for”. Deoarece există multe posibilități combinatorii posibile, aceasta a fost problema majoră care a încetinit generarea de rezultate. O modalitate de pre-alocare este pornirea buclei de la pasul final (exemplu: pentru $i = 300 : -1 : 1...$). O altă îmbunătățire este vectorizarea codului (revizuirea codului bazat pe bucle, orientat scalar pentru a utiliza matricea Matlab și operațiile vectoriale). Această îmbunătățire ameliorează, de asemenea, problema de mai sus a pre-alocării dimensiunii matricei. O modalitate de automatizare a tuturor compuşilor a fost adăugată – buclă „for ka”.

După vizualizarea posibilităților, se alege o „cea mai bună” orientare după similitudine pentru toate combinațiile a doi candidați. În mod normal, se acordă un scor mai mare candidaților cu atomi mai apropiați, dar o altă orientare poate părea mai bună cu ochiul liber. Acest lucru este notat astfel încât subiectivitatea este luată în considerare.

Programul oferă zeci de mii de rezultate în unele cazuri din care sunt alese cele cu cel mai bun scor. Parametrii sunt extrași dintr-o bază de date. Sunt prezentate exemple vizuale de scoruri bune și parametri asemănători (energia deasupra Hull, HUMO-LUMO, energia de formare precisă). Cele care prezintă doar o linie sau un plan de interes și cele cu același grup spațial sau asemănător sunt indicate ca posibile rezultate inevitabile – coincidențe. **Tabelul IV.13** prezintă exemple de cele mai bune scoruri găsite de programul nostru și similitudini între Ca₂Si 1009733 și alți candidați.

După vizualizarea acestor alinieri, se ia decizia de a ignora scorurile mai mici de 0,85 și candidații cu trei atomi potriviți și mai puțin. Cele mai relevante rezultate pentru chimie sunt aproape de scorul de 0,9 TM și peste 4 atomi potriviți. Din totalul de 293 de candidați inițiali referinți în anexa A, se iau acum în considerare 73. Încercând să rafinăm și mai mult rezultatele, se fac unele observații: unele similitudini pot fi deduse din informațiile grupului spațial fără a fi nevoie de comparații complicate; linia sau planul pot fi similare prin pură coincidență; atomii par îndepărtați, indiferent de scor. Parametrii sunt căutați în baza de date „The Materials Project”. Datele din primele patru coloane sunt folosite pentru a găsi alte similitudini și pentru a evalua similitudinile geometrice găsite de programul nostru. La sfârși-

tul datelor afișate va fi prezentă o statistică în care aceste patru coloane ajută la căutarea similitudinilor. **Tabelul IV.13** prezintă aceste date.

Energia peste Hull ^a eV/atom	HUMO- LUMO ^a eV	Energia de formare estimată ^a eV/atom	Grup spațial (număr internațional) ^a	Compus aliniat	scor TM	Număr de atomi suprapuși
0	0,55	-0,534	225	Ca ₂ Si 1009733		
0,037	0,06	-0,281	216	FeSiW 961653	0,8834	5
0	3,39	-1,525	225	Li ₂ S 1153	0,88658	12
0	0,22	-0,109	225	Mg ₂ Si 1367	0,96168	12
0,061	1,58	-1,759	166	MnO ₂ 25424	0,89772	4
0	1,2	-0,966	160	MoS ₂ 1434	0,92605	4
0,004	1,51	-0,961	187	MoS ₂ 1025874	0,97277	4
0,178	0	-0,393	160	Ni ₃ S ₂ 1220109	0,87572	5
2,223	0	1,432	216	SiCN 8003	0,88693	5
1,272	1,74	-1,774	225	SiO ₂ 10064	0,89502	5
0,122	5,2	-2,924	1	SiO ₂ 556319	0,85746	5
0,423	2,75	-2,622	3	SiO ₂ 556376	0,86406	7
0,088	5,38	-2,958	1	SiO ₂ 556994	0,93605	4
0,005	5,5	-3,04	92	SiO ₂ 6945	0,89372	5
0,005	5,79	-3,041	96	SiO ₂ 7029	0,89578	4
0,005	5,79	-3,041	96	SiO ₂ 7029	0,86471	5
0,571	4,01	-2,474	205	SiO ₂ 9258	0,88541	5
0,799	0,39	-1,028	1	SiO ₄ 685105	0,85895	6
0,015	0	-0,127	205	SiP ₂ 21065	0,86195	8
0,017	0,96	-1,871	60	SnO ₂ 12978	0,85761	8
0,162	2,1	-1,726	194	SnO ₂ 1041984	0,86931	4
0,246	0	-1,642	225	SnO ₂ 12979	0,85417	5
0,101	0,59	-1,787	205	SnO ₂ 697	0,93791	8
0,278	0,17	-0,193	216	SnS 10013	0,93215	8
0,157	0	0,157	216	SnSb 16365	0,99597	8
0,252	0,08	-0,013	216	SnTe 16364	0,99984	8
0	5,23	-2,75	225	SrCl ₂ 23209	0,9983	12
0	1,93	-2,263	14	TaNO 4165	0,87358	7
0	0	-1,38	160	Ta ₂ S ₂ 10014	0,92503	4
0	0	-0,7	194	Ti ₂ AlC 12990	0,88008	4
0,014	0	-0,629	166	Ti ₂ C 1217106	0,91731	4
0,05	0	-0,681	194	Ti ₃ C ₂ 1094034	0,89769	4
0,05	0	-0,681	194	Ti ₃ C ₂ 1094034	0,88785	5
0,002	0	-3,669	167	TiF ₃ 562468	0,86346	5
0,004	0	-0,53	225	TiH ₂ 24161	0,86808	5
0,7	0	0,171	216	TiNiSn 22782	0,94402	12
0,664	0	0,135	216	TiNiSn 623646	0,94296	12
0	0,45	-0,529	216	TiNiSn 924130	0,92494	8
0,25	1,38	-3,072	205	TiO ₂ 1102591	0,87957	6
0,25	1,38	-3,072	205	TiO ₂ 1102591	0,85096	11
0,005	2,53	-3,317	60	TiO ₂ 1439	0,89067	7
0,01	2,89	-3,312	62	TiO ₂ 2420244	0,89492	6
0,039	2,23	-3,283	14	TiO ₂ 430	0,87789	7
0,526	1,7	-2,796	11	TiO ₂ 572822	0,85873	5
0,046	1,93	-3,276	12	TiO ₂ 766454	0,87952	5
0,302	1,06	-3,02	225	TiO ₂ 1008677	0,87666	5

Energia peste Hull ^a eV/atom	HUMO- LUMO ^a eV	Energia de formare estimată ^a eV/atom	Grup spațial (număr internațional) ^a	Compus aliniat	scor TM	Număr de atomi suprapuși
0,302	1.06	-3.02	225	TiO ₂ 1008677	0,87665	5
0,153	2.45	-3.169	166	TiO ₂ 25433	0,92319	4
0,008	2.18	-3.314	15	TiO ₂ 34688	0,87535	7
0,002	0	-1.605	164	TiS ₂ 1101258	0,91004	4
0,542	0	-0,799	160	TiS ₃ 559374	0,85056	5
0	0	-0,538	63	TiSi₂ 1077503	0,89161	5
0,043	0	-2.477	14	VO ₂ 1102963	0,86704	6
0,308	0	-2.212	166	VO ₂ 25199	0,90084	4
0,539	1.12	-1.981	10	VO ₂ 559445	0,88066	4
0,018	0	-1.182	166	VOF 753622	0,92477	7
0,009	1,91	-2.489	2	VPO ₅ 1100906	0,86483	7
0,022	1.42	-2.477	129	VPO ₅ 19000	0,85845	5
0,018	0	-1.182	166	VS ₂ 1424931	0,93525	4
0,02	0	-2.212	65	VSbO ₄ 1100902	0,88819	7
0,757	0,08	-0,574	160	WNO 1216189	0,93273	4
1.229	0	-0,959	194	WO ₃ 1386422	0,90472	4
0,001	1.6	-0,882	160	WS ₂ 9813	0,92598	4
0,059	0,11	-0,747	156	Zn(InS ₂) ₂ 22253	0,91211	4
0,085	3.27	-1.028	166	ZnBr ₂ 569960	0,96721	4
0,002	3,56	-2.561	60	ZnF ₂ 7709	0,85582	8
0,141	1.8	-0,765	166	ZnI ₂ 570964	0,95341	4
0	1.07	-0,684	216	ZnTe 2176	0,85358	4
0,002	3.26	-2.052	13	ZnWO ₄ 18918	0,8773	7
0,89	0	0,733	216	ZrCrFe 631429	0,91997	8
0,007	0	-0,63	225	ZrH ₂ 24155	0,88558	5
0	3,53	-3.787	14	ZrO ₂ 2858	0,86592	7
0,029	2,99	-3.759	62	ZrO ₂ 755759	0,85039	5

^a Date despre materiale din Materials Project [25–40] și anexa A.

Tabelul IV.13 Date extrase din baza de date „The Materials Project” pentru Ca₂Si (material 1009733), scor de similitudine și atomi suprapuși.

Există câțiva candidați care împărtășesc, de asemenea, energia de formare anticipată apropiată: TiNiSn 924130 (posibilă coincidență), TiSi₂ 1077503 (în mod clar nu este o coincidență) și ZrH₂ 24155 (coincidență). Dintre acestea, primul are, de asemenea, un interval de bandă apropiat de cel al Ca₂Si 1009733. Două dintre ele au doar 5 atomi potriviți. Ca atare, trebuie avut grijă să nu eliminați candidații cu un număr redus de atomi potriviți. Până acum, scorurile relativ mici arată rezultate bune. **Figura IV.3** ilustrează aceste exemple.

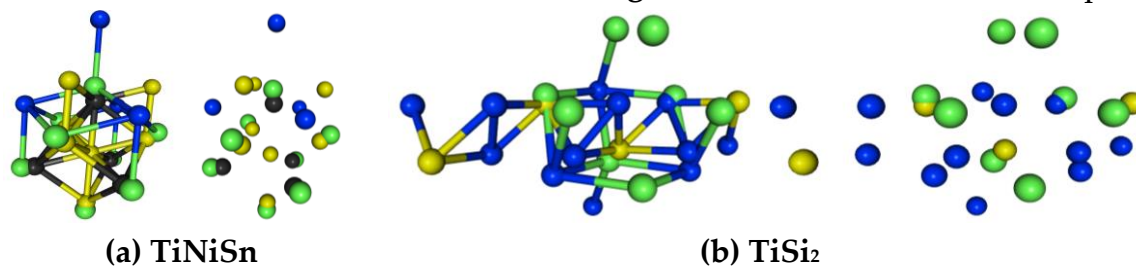


Figura IV.3. Ilustrații ale candidaților suprapuse la Ca₂Si 1009733.

Primul subiect este LiMn_2O_4 , material 1045561, prezentat în **Tabelul IV.14**:

Energia peste Hull ^a eV/atom	HUMO- LUMO ^a eV	Energia de formare estimată ^a eV/atom	Grup spațial (număr internațional) ^a	Compus aliniat	scor TM	Număr de atomi suprapuși
0,073	0	-1.992	10	LiMn_2O_4 1045561		
0,117	0	0,117	160	SnSb 1218916	0,8542	4
0,004	0,05	-1.603	12	TiS_2 1062030	0,9105	4

Tabelul IV.14. Similitudini între LiMn_2O_4 (material 1045561) și alți candidați.

Este normal ca unii candidați pur și simplu să nu prezinte similitudini geometrice față de alții, așa cum se poate observa și în **Tabelul IV.14**.

V. Concluzii și perspective

Screeningul High-Throughput este rezultatul aplicării algoritmilor de calcul și tehnicilor de învățare automată. Se pot identifica rapid materialele cu proprietăți dorite.

Se caută similitudini între compușii utilizați în echilibrele redox ale sistemelor de stocare a energiei. Datele afișate în primele patru coloane ale **Tabelelor IV.13-14** sunt folosite pentru a găsi alte similitudini și pentru a le evalua pe cele găsite de program. Parametrii mai comparabili sunt necesari pentru a filtra în continuare compușii similari și pentru a oferi informații valoroase despre aplicațiile acestora în sistemele de stocare a energiei.

Sunt prezentate îmbunătățiri aduse codului programului (scrise în MATLAB [494]) și enumerate câteva rezultate pentru a extrage concluzii despre aplicabilitatea acestei lucrări. Deși perechile de sume de valori proprii sunt similare, nu toate perechile de acest fel au o corespondență între valorile proprii singulare. Aceste rezultate nu sunt publicate în momentul scrierii. Căutarea a trebuit să se oprească undeva și a făcut-o la 293 de candidați comparați. Alinierea oferită de program ușurează vizualizarea candidaților suprapuși.

Este necesar ca bazele de date să crească precum bazele de date cu proteine.

Ar trebui testate și alte funcții de scor, eventual derivate prin extinderea polinoamelor. O soluție interesantă este polinomul imanant, care unifică alte polinoame. Alte polinoame unificatoare au fost dezvoltate și pot fi încercate.

Vizualizarea similitudinilor este ajutată de exportul de candidați aliniați și de oferirea unei modalități de a găsi candidatul pe care doriți să-l comparați. Sunt date exemple.

Rezultatele negative sunt exemplificate, numărul grupului spațial oferind eliminarea ușoară a coincidențelor. După vizualizare, uneori este clar că unele similitudini există doar într-o linie dreaptă sau într-un plan. Acestea ar trebui considerate ca și coincidențe. Modul în care au fost obținute structurile implică o tendință de a aduce atomii în colțurile unor celule și de a le asocia unor grupuri spațiale. Este posibil ca această alegere să fie mai puțin fericită, însă a fost și singura găsită. Simulări fără aceste preconcepții ar fi necesare pentru a evita coincidențe de grup spațial.

Mai mulți parametri trebuie adăugați în bazele de date, astfel încât să poată fi comparați într-un mod consecvent. Se arată că similitudinile geometrice găsite ajută în mică măsură pentru găsirea de parametri similari. Parametrii ar putea fi utilizați pentru a reduce numărul de candidați suprapuși care trebuie vizualizați. În cazul prezentului studiu, în medie, 1,5 % dintre rotații dau un scor mai mare de 0,85; 20 % dintre candidați prezintă similitudini geometrice între ei și 10 % dintre aceștia prezintă și alți parametri similari.

În cele din urmă, este de dorit un număr mic de compuși găsiți de algoritm pentru a reduce numărul de experimente care trebuie efectuate pentru a confirma sau infirma utilitatea rezultatelor găsite. Căutarea rezultatelor trebuie extinsă, însă timpul limitat va presupune utilizarea inteligenței artificiale.

Din păcate, parametrii din diferite surse sunt calculați în moduri diferite. Acesta este un alt motiv pentru care bazele de date continuă să crească. Ele păstrează o tehnică standard de măsurare. Acest lucru înseamnă, de asemenea, că mai mulți compuși sunt de dorit a fi analizați prin metodologia actuală pentru a crea o bază de date de similitudini geometrice.

Este necesară înțelegerea proceselor de transfer de electroni, a mecanismelor de stocare a sarcinii și a cineticii generale a reacțiilor poate fi obținută prin studierea geometriilor compușilor implicați în aceste sisteme: modul în care electronii sunt transferați între diferite stări de oxidare și modul în care aranjarea geometrică a atomilor influențează ușurința și eficiența transferului de electroni; să identifice posibile caracteristici structurale care permit stocarea eficientă a încărcăturii, cum ar fi prezența site-urilor redox-active, accesibilitatea site-urilor active pentru difuzia ionilor sau capacitatea de a acomoda modificări ale stărilor de oxidare fără rearanjamente structurale semnificative; prezența unor geometrii stabile de coordonare sau capacitatea de a rezista modificărilor structurale în timpul ciclării repetate.

Căutarea similitudinilor dintre compușii utilizați în sistemele de stocare a energiei s-a dovedit a fi o sarcină dificilă. În prezent, *ChP* s-a dovedit aplicabil la aminoacizi și este aplicat compușilor mai sus menționați.

Interesul pentru polinoamele în chimie este în continuă creștere. De exemplu, grafurile izo-spectrale [383] (care furnizează informații prețioase în chimie și fizică [384], cum ar fi cele discutate în colecția [385]) au fost recent scoase la iveală prin metode de partiție moleculară. Acest lucru se realizează prin împărțirea funcției de undă în spațiul Hilbert (de exemplu abordări bazate pe orbitali Mulliken); sau prin împărțirea unui descriptor molecular în spațiul real (de exemplu abordările bazate pe densitatea electronică ale lui Politzer) [386]. Alte două exemple recente de reprezentări vizuale sunt introduse: prin partiționarea unui graf [371]; și printr-un studiu de caz legat de utilizarea unui program dedicat dinamicii moleculare și fragmentelor [387].

Proiectarea conformerilor poate fi realizată, pe de o parte, prin aliniere moleculară [388], iar alinierea moleculară facilitează efectuarea ulterioară a screening-ului virtual în căutarea aplicațiilor lor biologice [389] (de exemplu, este un fapt binecunoscut că fructoza, glucoza și galactoza au aceeași formulă moleculară - sunt conformeri [390] - dar au un grad de

îndulcire diferit [391] și o solubilitate diferită [390]. Există diferențe cu impact major în procesarea lor în corpul uman, chiar dacă, din nou, toate au aproximativ aceeași valoare calorică de 4 kcal pe gram. Unii ar putea spune că doar conformația contează).

Găsirea seturilor de vârfuri înrudite în grafuri este o modalitate de grupare, iar pentru mai multe detalii cititorul ar trebui să consulte [392]. O rută alternativă pentru generarea de conformeri este prin partiționarea vârfurilor grafurilor în grupe relevante din punct de vedere chimic. Partiționarea vârfurilor grafurilor duce la recunoașterea elementelor 2-subcolorabile [393], bipartite [394], cluster [395], dominabile [396], monopolar [397], r-partit [398], divizat [399], unipolar [400], grafuri trapezoidale [401]etc.; au fost concepuți algoritmi pentru a lucra eficient cu aceste clase speciale de grafuri (pentru monopolar și 2-subcolorabil în [402]; pentru divizare unipolară și generalizată în [403]; pentru partiționarea unui graf mare în k subgrafuri în [404,405]; pentru grafuri care nu conțin ca subgraf indus o gheară [406]). Fiecare dintre aceste rezultate ale partiționării oferă oportunitatea de a redirecționa cercetarea în cazul unui blocaj. Acest lucru va oferi (dacă este necesar) rute și abordări alternative [402]. Principiile de bază vor fi evaluate pentru analiza conformer folosind polinoame și strategii propuse în [407,408]. De asemenea, colorarea vârfurilor în grafuri poate rezolva o serie de probleme reale în multe domenii științifice. Diferite scheme de colorare au fost propuse pe baza distanțelor [409], șabloanelor [410], adiacențelor [411], euristiciilor [412] și pseudo-aleatorii (constrângeri, Grundy și dominante în culoare) în [413]; în timp ce proprietățile colorărilor au fost studiate în [414], iar numărarea colorărilor distinctive (ruperea simetriei) cu k culori în [415]. Polinoamele pot servi la furnizarea diferitelor scheme de colorare, dezvăluind o cale alternativă teoretică interesantă pentru utilizarea propusă a acestora.

Direcțiile aplicative au întotdeauna impact. De exemplu, clusterii de bor radiomarcați au aplicații în diagnosticarea și tratamentul cancerului. Conformațiile biologice active se află întotdeauna pe lista de top a celor căutate de dezvoltatorii de medicamente. Se propune o nouă utilizare pentru polinoame în conjuncție cu analiza conformerilor și a clusterelor.

Alte direcții de extindere ale propunerii, departe de aplicațiile chimice: tăierea unui graf în bucăți mai mici este una dintre operațiile algoritmice fundamentale; partiționarea grafurilor mari este adesea o sub-problemă importantă pentru reducerea complexității sau paralelizare [416]; este abordată problema k -partiției echilibrate conexe, cu (sau fără [417]) ponderi nenegative pe vârfuri [418,419]; în același context, este abordată problema partiționării grafurilor cu gol minim [420]; au fost studiate strategiile de partiționare pe grafurile cadrului de descriere a resurselor [421,422]; contracția grafurilor (crearea unui minor al grafurilor [423]) servește în unele probleme specifice legate de grafuri [424]; atunci când descoperirea motivelor paralele este utilizată pe rețele complexe [425], partiționarea grafurilor împarte rețeaua pentru o paralelizare eficientă (împarte într-un număr aproximativ egal de vârfuri în părți); Sunt disponibile strategii bazate pe euristici spectrale [426] (problema proprie în [363]), combinatoriale [427], geometrice [428] sau multi-nivel [429].

Bibliografie

1. Mohamed, N.; Allam, N.K. Recent Advances in the Design of Cathode Materials for Li-Ion Batteries. *RSC Adv.* **2020**, *10*, 21662–21685, doi:10.1039/D0RA03314F.
2. Osterloh, W.R.; Conradie, J.; Alemayehu, A.B.; Ghosh, A.; Kadish, K.M. The Question of the Redox Site in Metal–Metal Multiple-Bonded Metalloporphyrin Dimers. *ACS Org. Inorg. Au* **2023**, *3*, 35–40, doi:10.1021/acsoiginorgau.2c00030.
3. Parvathy Anitha Sukkurji Advanced Anode and Cathode Materials for Li-Ion Batteries: Application to Printing Methodology, Karlsruhe Institut für Technologie, 2021.
4. Mutter, D.; Urban, D.F.; Elsässer, C. Computational Analysis of Composition-Structure-Property Relationships in NZP-Type Materials for Li-Ion Batteries. *Journal of Applied Physics* **2019**, *125*, 215115, doi:10.1063/1.5091969.
5. Behbahan, A.S.; Alizadeh, A.; Mahmoudi, M.; Shamsborhan, M.; Al-Musawi, T.J.; Pasha, P. A New Adomian Decomposition Technique for a Thermal Analysis Forced Non-Newtonian Magnetic Reiner-Rivlin Viscoelastic Fluid Flow. *Alexandria Engineering Journal* **2023**, *80*, 48–57, doi:10.1016/j.aej.2023.08.036.
6. Fika, P. Approximation of the Tikhonov Regularization Parameter through Aitken's Extrapolation. *Applied Numerical Mathematics* **2023**, *190*, 270–282, doi:10.1016/j.apnum.2023.04.008.
7. Gutierrez, C.; Gutierrez, F.; Rivara, M.-C. Complexity of the Bisection Method. *Theoretical Computer Science* **2007**, *382*, 131–138, doi:10.1016/j.tcs.2007.03.004.
8. Sharma, H.; Kansal, M. A Modified Chebyshev–Halley-type Iterative Family with Memory for Solving Nonlinear Equations and Its Stability Analysis. *Math Methods in App Sciences* **2023**, *46*, 12549–12569, doi:10.1002/mma.9197.
9. Petković, I.; Herceg, Đ. Computers in Mathematical Research: The Study of Three-Point Root-Finding Methods. *Numer Algor* **2020**, *84*, 1179–1198, doi:10.1007/s11075-019-00796-6.
10. Lu, Y.; Tang, Y. Solving Fractional Differential Equations Using Collocation Method Based On hybrid of Block-Pulse Functions and Taylor Polynomials. *Turk J Math* **2021**, *45*, 1065–1078, doi:10.3906/mat-2006-2.
11. Assari, P.; Dehghan, M. A Meshless Local Galerkin Method for Solving Volterra Integral Equations Deduced from Nonlinear Fractional Differential Equations Using the Moving Least Squares Technique. *Applied Numerical Mathematics* **2019**, *143*, 276–299, doi:10.1016/j.apnum.2019.04.014.
12. Farhood, A.K.; Mohammed, O.H. Homotopy Perturbation Method for Solving Time-Fractional Nonlinear Variable-Order Delay Partial Differential Equations. *Partial Differential Equations in Applied Mathematics* **2023**, *7*, 100513, doi:10.1016/j.padiff.2023.100513.
13. Argyros, I.K.; Sharma, D.; Argyros, C.I.; Parhi, S.K.; Sunanda, S.K.; Argyros, M.I. Extended Three Step Sixth Order Jarratt-like Methods under Generalized Conditions for Nonlinear Equations. *Arab. J. Math.* **2022**, *11*, 443–457, doi:10.1007/s40065-022-00379-9.
14. Pho, K.-H. Improvements of the Newton–Raphson Method. *Journal of Computational and Applied Mathematics* **2022**, *408*, 114106, doi:10.1016/j.cam.2022.114106.
15. Argyros, I.K.; George, S. Local Convergence of Osada's Method for Finding Zeros with Multiplicity. In *Understanding Banach Spaces*; Sánchez, D.G., Ed.; Nova Science Publishers: Hauppauge, NY, USA, 2019; pp. 147–151.
16. Sharma, J.R.; Kumar, D.; Argyros, I.K. An Efficient Class of Traub–Steffensen-Like Seventh Order Multiple-Root Solvers with Applications. *Symmetry* **2019**, *11*, 518, doi:10.3390/sym11040518.
17. Christian Beleña Postigo Ostrowski's Method for Solving Nonlinear Equations and Systems. *JMEA* **2023**, *13*, doi:10.17265/2159-5275/2023.01.001.

18. Coclite, G.M.; Fanizzi, A.; Lopez, L.; Maddalena, F.; Pellegrino, S.F. Numerical Methods for the Nonlocal Wave Equation of the Peridynamics. *Applied Numerical Mathematics* **2020**, *155*, 119–139, doi:10.1016/j.apnum.2018.11.007.
19. Darvishi, M.T.; Barati, A. A Fourth-Order Method from Quadrature Formulae to Solve Systems of Nonlinear Equations. *Applied Mathematics and Computation* **2007**, *188*, 257–261, doi:10.1016/j.amc.2006.09.115.
20. Nisha, S.; Parida, P.K. Super-Halley Method under Majorant Conditions in Banach Spaces. *Cubo* **2020**, *22*, 55–70, doi:10.4067/S0719-06462020000100055.
21. Putri, R.Y.; Wartono, W. Modifikasi Metode Schroder Tanpa Turunan Kedua Dengan Orde Konvergensi Empat. *AKS* **2020**, *11*, 240–251, doi:10.26877/aks.v11i2.6060.
22. Temple, B.; Young, R. Inversion of a Non-Uniform Difference Operator and a Strategy for Nash–Moser. *Methods and Applications of Analysis* **2022**, *29*, 265–294, doi:10.4310/MAA.2022.v29.n3.a3.
23. Ivanov, S.I. General Local Convergence Theorems about the Picard Iteration in Arbitrary Normed Fields with Applications to Super–Halley Method for Multiple Polynomial Zeros. *Mathematics* **2020**, *8*, 1599, doi:10.3390/math8091599.
24. Jamaludin, N.A.A.; Nik Long, N.M.A.; Salimi, M.; Sharifi, S. Review of Some Iterative Methods for Solving Nonlinear Equations with Multiple Zeros. *Afr. Mat.* **2019**, *30*, 355–369, doi:10.1007/s13370-018-00650-3.
25. Jain, A.; Ong, S.P.; Hautier, G.; Chen, W.; Richards, W.D.; Dacek, S.; Cholia, S.; Gunter, D.; Skinner, D.; Ceder, G.; et al. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Materials* **2013**, *1*, 011002, doi:10.1063/1.4812323.
26. De Jong, M.; Chen, W.; Geerlings, H.; Asta, M.; Persson, K.A. A Database to Enable Discovery and Design of Piezoelectric Materials. *Sci Data* **2015**, *2*, 150053, doi:10.1038/sdata.2015.53.
27. Wang, A.; Kingsbury, R.; McDermott, M.; Horton, M.; Jain, A.; Ong, S.P.; Dwaraknath, S.; Persson, K. A Framework for Quantifying Uncertainty in DFT Energy Corrections 2021.
28. Munro, J.M.; Latimer, K.; Horton, M.K.; Dwaraknath, S.; Persson, K.A. An Improved Symmetry-Based Approach to Reciprocal Space Path Selection in Band Structure Calculations. *npj Comput Mater* **2020**, *6*, 112, doi:10.1038/s41524-020-00383-7.
29. De Jong, M.; Chen, W.; Angsten, T.; Jain, A.; Notestine, R.; Gamst, A.; Sluiter, M.; Krishna Ande, C.; Van Der Zwaag, S.; Plata, J.J.; et al. Charting the Complete Elastic Properties of Inorganic Crystalline Compounds. *Sci Data* **2015**, *2*, 150009, doi:10.1038/sdata.2015.9.
30. Ding, H.; Dwaraknath, S.S.; Garten, L.; Ndione, P.; Ginley, D.; Persson, K.A. Computational Approach for Epitaxial Polymorph Stabilization through Substrate Selection. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2016**, *8*, 13086–13093, doi:10.1021/acsami.6b01630.
31. Patel, A.M.; Nørskov, J.K.; Persson, K.A.; Montoya, J.H. Efficient Pourbaix Diagrams of Many-Element Compounds. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 25323–25327, doi:10.1039/C9CP04799A.
32. Singh, A.K.; Zhou, L.; Shinde, A.; Suram, S.K.; Montoya, J.H.; Winston, D.; Gregoire, J.M.; Persson, K.A. Electrochemical Stability of Metastable Materials. *Chem. Mater.* **2017**, *29*, 10159–10167, doi:10.1021/acs.chemmater.7b03980.
33. Latimer, K.; Dwaraknath, S.; Mathew, K.; Winston, D.; Persson, K.A. Evaluation of Thermodynamic Equations of State across Chemistry and Structure in the Materials Project. *npj Comput Mater* **2018**, *4*, 40, doi:10.1038/s41524-018-0091-x.
34. Jain, A.; Hautier, G.; Ong, S.P.; Moore, C.J.; Fischer, C.C.; Persson, K.A.; Ceder, G. Formation Enthalpies by Mixing GGA and GGA + U Calculations. *Phys. Rev. B* **2011**, *84*, 045115, doi:10.1103/PhysRevB.84.045115.
35. Zheng, H.; Li, X.-G.; Tran, R.; Chen, C.; Horton, M.; Winston, D.; Persson, K.A.; Ong, S.P. Grain Boundary Properties of Elemental Metals. *Acta Materialia* **2020**, *186*, 40–49, doi:10.1016/j.actamat.2019.12.030.

36. Horton, M.K.; Montoya, J.H.; Liu, M.; Persson, K.A. High-Throughput Prediction of the Ground-State Collinear Magnetic Order of Inorganic Materials Using Density Functional Theory. *npj Comput Mater* **2019**, *5*, 64, doi:10.1038/s41524-019-0199-7.
37. Petousis, I.; Mrdjenovich, D.; Ballouz, E.; Liu, M.; Winston, D.; Chen, W.; Graf, T.; Schladt, T.D.; Persson, K.A.; Prinz, F.B. High-Throughput Screening of Inorganic Compounds for the Discovery of Novel Dielectric and Optical Materials. *Sci Data* **2017**, *4*, 160134, doi:10.1038/sdata.2016.134.
38. Persson, K.A.; Waldwick, B.; Lazic, P.; Ceder, G. Prediction of Solid-Aqueous Equilibria: Scheme to Combine First-Principles Calculations of Solids with Experimental Aqueous States. *Phys. Rev. B* **2012**, *85*, 235438, doi:10.1103/PhysRevB.85.235438.
39. Tran, R.; Xu, Z.; Radhakrishnan, B.; Winston, D.; Sun, W.; Persson, K.A.; Ong, S.P. Surface Energies of Elemental Crystals. *Sci Data* **2016**, *3*, 160080, doi:10.1038/sdata.2016.80.
40. Aykol, M.; Dwaraknath, S.S.; Sun, W.; Persson, K.A. Thermodynamic Limit for Synthesis of Metastable Inorganic Materials. *Sci. Adv.* **2018**, *4*, eaaq0148, doi:10.1126/sciadv.aaq0148.
41. Ntie-Kang, F.; Yong, J.N. The Chemistry and Biological Activities of Natural Products from Northern African Plant Families: From Aloaceae to Cupressaceae. *RSC Adv.* **2014**, *4*, 61975–61991, doi:10.1039/C4RA11467A.
42. Mypati, S.; Khazaeli, A.; Barz, D.P.J. A Novel Rechargeable Zinc–Copper Battery without a Separator. *Journal of Energy Storage* **2021**, *42*, 103109, doi:10.1016/j.est.2021.103109.
43. Jäntschi, L. Potential of Electrical Cells: The Effect of the Experimental Design on the Results. In Proceedings of the 2023 International Conference on Clean Electrical Power (ICCEP); IEEE: Terrasini, Italy, June 27 2023; pp. 622–629.
44. Stoenoiu, C.E.; Jäntschi, L. Simultaneous Determinations for the Internal Resistance of Three Batteries. Three Analytical Methods Involved. In Proceedings of the 2023 10th International Conference on Modern Power Systems (MPS); IEEE: Cluj-Napoca, Romania, June 21 2023; pp. 01–05.
45. Ye, H.; Ng, J. Shielding Effects of Myelin Sheath on Axolemma Depolarization under Transverse Electric Field Stimulation. *PeerJ* **2018**, *6*, e6020, doi:10.7717/peerj.6020.
46. Younesi, R. Batteries: An Important Piece in the Puzzle of Renewable Energies for a Better World. *Front. Energy Res.* **2014**, *2*, doi:10.3389/fenrg.2014.00014.
47. Walker, Robert (1801–1865), Church of England Clergyman and Physicist. In *The Oxford Dictionary of National Biography*; Matthew, H.C.G., Harrison, B., Simcock, A.V., Eds.; Oxford University Press: Oxford, 2004 ISBN 978-0-19-861412-8.
48. Chambers, W.; Chambers, R. *Chambers's Journal of Popular Literature, Science and Arts*; Fourth series; Cornell University, 1873; Vol. 10 Iss 472;
49. Berg, H. Johann Wilhelm Ritter - The Founder of Scientific Electrochemistry. *Rev. Polarogr.* **2008**, *54*, 99–103, doi:10.5189/revpolarography.54.99.
50. Tinazzi, M. *The Life and the Work of Giuseppe Zamboni at the Light of His Unpublished Letters*; Liceo Scientifico "G. Fracastoro", via Moschini 11, 2013;
51. William Hyde Wollaston. *Phys. Today* **2015**, doi:10.1063/PT.5.031023.
52. Kosky, P.; Balmer, R.; Keat, W.; Wise, G. Electrochemical Engineering. In *Exploring Engineering*; Elsevier, 2021; pp. 383–403 ISBN 978-0-12-815073-3.
53. Murray, J. *Bird's First Publication of His Modification of the Daniell Cell*; Seventh Meeting of the British Society for the Advancement of Science; London, 1837; p. 45;.
54. Jindal, S.L. A Useful Electric Cell. *Nature* **1927**, *119*, 639–639, doi:10.1038/119639a0.

55. Sallami, A.; Mzoughi, D.; Mami, A. Robust Diagnosis of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Bond Graph Methodology – Physical and Electrical Faults Detection and Isolation. *Adv. Sci. Technol. Res. J.* **2019**, *13*, 194–203, doi:10.12913/22998624/111704.
56. *A Dictionary of Electronics and Electrical Engineering*; Butterfield, A.J., Szymanski, J., Eds.; Oxford University Press, 2018; Vol. 1; ISBN 978-0-19-872572-5.
57. Bunsen, R. Ueber Die Anwendung Der Kohle Zu Volta'schen Batterien. *Annalen der Physik* **1841**, *130*, 417–430, doi:10.1002/andp.18411301109.
58. King, W.J. *The Development of Electrical Technology in the 19th Century: The Electrochemical Cell and the Electromagnet*; Bulletin; Smithsonian Institute, 1962;
59. Newman, J.S.; Thomas-Alyea, K.E. *Electrochemical Systems*; 3rd ed.; J. Wiley: Hoboken, N.J, 2004; ISBN 978-0-471-47756-3.
60. Kuratani, K.; Fukami, K.; Tsuchiya, H.; Usui, H.; Chiku, M.; Yamazaki, S. Electrochemical Polarization Part 1: Fundamentals and Corrosion. *Electrochemistry* **2022**, *90*, 102003–102003, doi:10.5796/electrochemistry.22-66085.
61. Padmaraj, D.; Miller, J.H.; Wosik, J.; Zagodzón-Wosik, W. Reduction of Electrode Polarization Capacitance in Low-Frequency Impedance Spectroscopy by Using Mesh Electrodes. *Biosensors and Bioelectronics* **2011**, *29*, 13–17, doi:10.1016/j.bios.2011.06.050.
62. Huang, Z.; Mu, A. Research and Analysis of Performance Improvement of Vanadium Redox Flow Battery in Microgrid: A Technology Review. *Intl J of Energy Research* **2021**, *45*, 14170–14193, doi:10.1002/er.6716.
63. Qi, M.-Y.; Xu, Y.-S.; Guo, S.-J.; Zhang, S.-D.; Li, J.-Y.; Sun, Y.-G.; Jiang, K.-C.; Cao, A.-M.; Wan, L.-J. The Functions and Applications of Fluorinated Interface Engineering in Li-Based Secondary Batteries. *Small Science* **2021**, *1*, 2100066, doi:10.1002/smssc.202100066.
64. Pali-Casanova, R.; Yam-Cervantes, M.; Zavala-Loría, J.; Loría-Bastarrachea, M.; Aguilar-Vega, M.; Dzullópez, L.; Sámano-Celorio, M.; Crespo-Álvarez, J.; García-Villena, E.; Agudo-Toyos, P.; et al. Effect of Sulfonic Groups Concentration on IEC Properties in New Fluorinated Copolyamides. *Polymers* **2019**, *11*, 1169, doi:10.3390/polym11071169.
65. Alfred Dun Patent US312339A Galvanic Element 1885.
66. Carl Gassner Patent US373064A Galvanic Battery 1887.
67. Efe, Ş.; Güngör, Z.A. Geçmişten Günümüze Batarya Teknolojisi. *European Journal of Science and Technology* **2022**, doi:10.31590/ejosat.1048673.
68. Pickard, W.F. Massive Electricity Storage for a Developed Economy of Ten Billion People. *IEEE Access* **2015**, *3*, 1392–1407, doi:10.1109/ACCESS.2015.2469255.
69. Edison, T. *Proprietor Paperback Catalogue of Edison-Lalande Batteries*; Edison Manufacturing CO.: New York, 2012;
70. Mauger, A.; Julien, C.M. Critical Review on Lithium-Ion Batteries: Are They Safe? Sustainable? *Ionics* **2017**, *23*, 1933–1947, doi:10.1007/s11581-017-2177-8.
71. Edelman, F. The Life and Legacy of Thomas Midgley Jr. *PPRST* **2016**, *150*, 45–49, doi:10.26749/rstpp.150.1.45.
72. George W. Heise Patent US1899615A Air-Depolarized Primary Battery 1925.
73. Marsal, P.A.; Karl, K.; Urry, L.F. Patent US2960558A Dry Cell 1957.
74. Krishna Sapru; Benjamin Reichman; Arie Reger; Stanford R. Ovshinsky Patent US4623597A Rechargeable Battery and Electrode Used Therein 1985.
75. Wang, Y.; Li, T.; Li, Y.; Yang, R.; Zhang, G. 2D-Materials-Based Wearable Biosensor Systems. *Biosensors* **2022**, *12*, 936, doi:10.3390/bios12110936.

76. Zheng, X.; Jiang, W.; Yin, L.; Fu, Y. Optimal Energy Allocation Algorithm of Li-Battery/Super Capacitor Hybrid Energy Storage System Based on Dynamic Programming Algorithm. *E3S Web Conf.* **2021**, *231*, 01001, doi:10.1051/e3sconf/202123101001.
77. Moss, J.B. Computational and Experimental Studies on Energy Storage Materials and Electrocatalysts., doi:10.26076/ER73-DY50.
78. Vanderbruggen, A. Lithium Ion Batteries Recycling with Froth Flotation - A Study on Characterization and Liberation Strategies. PhD Thesis, Aalto University, 2022.
79. Marvin Messing Advanced Characterization of Battery Cell Dynamics. PhD Thesis, McMaster University, 2021.
80. Marie-Therese von Srbik Advanced Lithium-Ion Battery Modelling for Automotive Applications. PhD Thesis, Imperial College London, 2015.
81. Claudio Brivio Battery Energy Storage Systems: Modelling, Applications and Design Criteria. PhD Thesis, POLITECNICO DI MILANO, 2017.
82. Christian Achim Hellwig Modeling, Simulation and Experimental Investigation of the Thermal and Electrochemical Behavior of a LiFePO₄-Based Lithium-Ion Battery. PhD Thesis, Universität Stuttgart, 2013.
83. Marc Dylan Berliner Simulating, Controlling, and Understanding Lithium-Ion Battery Models. PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2023.
84. Rutooj D. Deshpande Understanding and Improving Lithium Ion Batteries through Mathematical Modeling and Experiments. PhD Thesis, University of Kentucky, 2011.
85. Trevisanello, E.; Ruess, R.; Conforto, G.; Richter, F.H.; Janek, J. Polycrystalline and Single Crystalline NCM Cathode Materials—Quantifying Particle Cracking, Active Surface Area, and Lithium Diffusion. *Advanced Energy Materials* **2021**, *11*, 2003400, doi:10.1002/aenm.202003400.
86. Gheytnazadeh, M.; Baghban, A.; Habibzadeh, S.; Mohaddespour, A.; Abida, O. Insights into the Estimation of Capacitance for Carbon-Based Supercapacitors. *RSC Adv.* **2021**, *11*, 5479–5486, doi:10.1039/D0RA09837J.
87. Liu, Y.; Ma, C.; Wang, K.; Chen, J. Recent Advances in Porous Carbons for Electrochemical Energy Storage. *New Carbon Materials* **2023**, *38*, 1–15, doi:10.1016/S1872-5805(23)60710-3.
88. Kartsonakis, I.A. Special Issue on “Phase Change Materials: Design and Applications.” *Applied Sciences* **2022**, *12*, 7770, doi:10.3390/app12157770.
89. Diudea, M.V. Counting Polynomials in Tori T(4,4)S[c,n]. *Acta Chim. Slov.* **2010**, *57*, 551–558.
90. Eliasi, M.; Taeri, B. Extension of the Wiener Index and Wiener Polynomial. *Appl. Math. Lett.* **2008**, *21*, 916–921, doi:10.1016/j.aml.2007.10.001.
91. Parveen, S.; Awan, N.U.H.; Farooq, F.B.; Hussain, S. Topological Descriptors and QSPR Models of Drugs Used in Blood Cancer. *Punjab Univ. J. Math.* **2023**, *55*, 27–43, doi:10.52280/pujm.2023.550103.
92. Alviso, D.; Aguerre, H.; Nigro, N.; Artana, G. Prediction of the Physico-Chemical Properties of Vegetable Oils Using Optimal Non-Linear Polynomials. *Fuel* **2023**, *350*, 128868, doi:10.1016/j.fuel.2023.128868.
93. Calingaert, G.; Hladky, J.W. A Method of Comparison and Critical Analysis of the Physical Properties of Homologs and Isomers. The Molecular Volume of Alkanes *. *J. Am. Chem. Soc.* **1936**, *58*, 153–157, doi:10.1021/ja01292a044.
94. Kurtz, S.S.; Lipkin, M.R. Molecular Volume of Saturated Hydrocarbons. *Ind. Eng. Chem.* **1941**, *33*, 779–786, doi:10.1021/ie50378a021.
95. Wiener, H. Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *J. Am. Chem. Soc.* **1947**, *69*, 17–20, doi:10.1021/ja01193a005.
96. Liu, J.-B.; Javed, S.; Javaid, M.; Shabbir, K. Computing First General Zagreb Index of Operations on Graphs. *IEEE Access* **2019**, *7*, 47494–47502, doi:10.1109/ACCESS.2019.2909822.

97. *Chemical Graph Theory: Introduction and Fundamentals*; Bonchev, D., Rouvray, D.H., Eds.; Mathematical chemistry; Abacus Press: New York, 1991; ISBN 978-0-85626-454-2.
98. Dalton, J.; Scattergood, T.; Thorpe, T.E. *A New System of Chemical Philosophy*; Printed by S. Russell ... for R. Bickerstaff, ... London: Manchester, 1808;
99. Wollaston, W.H. On Super-Acid and Sub-Acid Salts. *Philos. Trans. R. Soc. Lond., B, Biol. Sci.* **1808**, 98, 96–102.
100. Kopp, H. Ueber den Zusammenhang zwischen der chemischen Constitution und einigen physikalischen Eigenschaften bei flüssigen Verbindungen. *Ann. Chem. Pharm.* **1844**, 50, 71–144, doi:10.1002/jlac.18440500105.
101. Cayley LVII. *On the Mathematical Theory of Isomers. Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.* **1874**, 47, 444–447, doi:10.1080/14786447408641058.
102. Cayley, E. Ueber Die Analytischen Figuren, Welche in Der Mathematik Bäume Genannt Werden Und Ihre Anwendung Auf Die Theorie Chemischer Verbindungen. *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1875**, 8, 1056–1059, doi:10.1002/cber.18750080252.
103. Sylvester, J.J. On an Application of the New Atomic Theory to the Graphical Representation of the Invariants and Covariants of Binary Quantics, with Three Appendices. *Am. J. Math.* **1878**, 1, 64, doi:10.2307/2369436.
104. Pólya, G. Kombinatorische Anzahlbestimmungen Für Gruppen, Graphen Und Chemische Verbindungen. *Acta Math.* **1937**, 68, 145–254, doi:10.1007/BF02546665.
105. Platt, J.R. Prediction of Isomeric Differences in Paraffin Properties. *J. Phys. Chem.* **1952**, 56, 328–336, doi:10.1021/j150495a009.
106. Platt, J.R. Influence of Neighbor Bonds on Additive Bond Properties in Paraffins. *J. Chem. Phys.* **1947**, 15, 419–420, doi:10.1063/1.1746554.
107. Gordon, M.; Scantlebury, G.R. Non-Random Polycondensation: Statistical Theory of the Substitution Effect. *Trans. Faraday Soc.* **1964**, 60, 604, doi:10.1039/tf9646000604.
108. Hosoya, H. Topological Index. A Newly Proposed Quantity Characterizing the Topological Nature of Structural Isomers of Saturated Hydrocarbons. *BCSJ* **1971**, 44, 2332–2339, doi:10.1246/bcsj.44.2332.
109. Gutman, I.; Ruščić, B.; Trinajstić, N.; Wilcox, C.F. Graph Theory and Molecular Orbitals. XII. Acyclic Polyenes. *J. Chem. Phys.* **1975**, 62, 3399–3405, doi:10.1063/1.430994.
110. Balaban, A.T. Chemical Graphs: XXXIV. Five New Topological Indices for the Branching of Tree-like Graphs [1]. *Theoret. Chim. Acta* **1979**, 53, 355–375, doi:10.1007/BF00555695.
111. Bonchev, D.; Balaban, A.T.; Mekenyan, O. Generalization of the Graph Center Concept, and Derived Topological Centric Indexes. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1980**, 20, 106–113, doi:10.1021/ci60022a011.
112. Bonchev, D.; Balaban, A.T.; Randić, M. The Graph Center Concept for Polycyclic Graphs. *Int. J. Quantum Chem.* **1981**, 19, 61–82, doi:10.1002/qua.560190107.
113. Bonchev, D.; Mekenyan, O.; Balaban, A.T. Iterative Procedure for the Generalized Graph Center in Polycyclic Graphs. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1989**, 29, 91–97, doi:10.1021/ci00062a007.
114. Schultz, H.P. Topological Organic Chemistry. 1. Graph Theory and Topological Indices of Alkanes. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1989**, 29, 227–228, doi:10.1021/ci00063a012.
115. Schultz, H.P.; Schultz, E.B.; Schultz, T.P. Topological Organic Chemistry. 2. Graph Theory, Matrix Determinants and Eigenvalues, and Topological Indexes of Alkanes. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1990**, 30, 27–29, doi:10.1021/ci00065a007.
116. Randić, M. Characterization of Molecular Branching. *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, 97, 6609–6615, doi:10.1021/ja00856a001.
117. Kier, L.B.; Hall, L.H. *Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis*; Chemometrics series; Research Studies Press; Wiley: Letchworth, Hertfordshire, England; New York, 1986; ISBN 978-0-471-90983-5.

118. Kier, L.B.; Hall, L.H. *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*; Medicinal chemistry; Academic Press: New York, 1976; ISBN 978-0-12-406560-4.
119. Kier, L.B.; Hall, L.H.; Murray, W.J.; Randi, M. Molecular Connectivity I: Relationship to Nonspecific Local Anesthesia. *J. Pharm. Sci.* **1975**, *64*, 1971–1974, doi:10.1002/jps.2600641214.
120. Kier, L.B.; Murray, W.J.; Randić, M.; Hall, L.H. Molecular Connectivity V: Connectivity Series Concept Applied to Density. *J. Pharm. Sci.* **1976**, *65*, 1226–1230, doi:10.1002/jps.2600650824.
121. Bonchev, D.; Trinajstić, N. Information Theory, Distance Matrix, and Molecular Branching. *J. Chem. Phys.* **1977**, *67*, 4517–4533, doi:10.1063/1.434593.
122. Merrifield, R.E.; Simmons, H.E. The Structures of Molecular Topological Spaces. *Theoret. Chim. Acta* **1980**, *55*, 55–75, doi:10.1007/BF00551410.
123. Merrifield, R.E.; Simmons, H.E. Enumeration of Structure-Sensitive Graphical Subsets: Calculations. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1981**, *78*, 1329–1332.
124. Merrifield, R.E.; Simmons, H.E. Enumeration of Structure-Sensitive Graphical Subsets: Theory. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1981**, *78*, 692–695.
125. Bonchev, D.; Mekenyan, O.V.; Trinajstić, N. Isomer Discrimination by Topological Information Approach. *J. Comput. Chem.* **1981**, *2*, 127–148, doi:10.1002/jcc.540020202.
126. Balaban, A.T. Highly Discriminating Distance-Based Topological Index. *Chem. Phys. Lett.* **1982**, *89*, 399–404, doi:10.1016/0009-2614(82)80009-2.
127. Basak, S.C.; Magnuson, V.R. Molecular Topology and Narcosis. A Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) Study of Alcohols Using Complementary Information Content (CIC). *Arzneimittelforschung* **1983**, *33*, 501–503.
128. Bertz, S.H. Branching in Graphs and Molecules. *Discrete Appl. Math.* **1988**, *19*, 65–83, doi:10.1016/0166-218X(88)90006-6.
129. Kier, L.B.; Hall, L.H. An Electrotopological-State Index for Atoms in Molecules. *Pharm. Res.* **1990**, *7*, 801–807, doi:10.1023/a:1015952613760.
130. Hall, L.H.; Kier, L.B. Electrotopological State Indices for Atom Types: A Novel Combination of Electronic, Topological, and Valence State Information. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1995**, *35*, 1039–1045, doi:10.1021/ci00028a014.
131. Lovász, L.; Pelikán, J. On the Eigenvalues of Trees. *Period. Math. Hung.* **1973**, *3*, 175–182, doi:10.1007/BF02018473.
132. Filip, P.A.; Balaban, T.-S.; Balaban, A.T. A New Approach for Devising Local Graph Invariants: Derived Topological Indices with Low Degeneracy and Good Correlation Ability. *J. Math. Chem.* **1987**, *1*, 61–83, doi:10.1007/BF01205338.
133. Historical Development of Topological Indices. In *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPAR*; Devillers, J., Balaban, A.T., Eds.; CRC Press, 2000; pp. 31–68 ISBN 978-0-429-18059-0.
134. Gutman, I. Degree-Based Topological Indices. *Croat. Chem. Acta* **2013**, *86*, 351–361, doi:10.5562/cca2294.
135. Ghorbani, M.; Hosseinzadeh, M.A. The Third Version Of Zagreb Index. *Discrete Math. Algorithm. Appl.* **2013**, *05*, 1350039, doi:10.1142/S1793830913500390.
136. Gao, W.; Farahani, M.R.; Jamil, M.K. The Eccentricity Version of Atom-Bond Connectivity Index of Linear Polycene Parallelogram Benzenoid $ABC_5(P(n,n))$. *Acta Chim. Slov.* **2016**, *63*, 376–379, doi:10.17344/acsi.2016.2378.
137. Hosamani, S.M. Computing Sanskruti Index of Certain Nanostructures. *J. Appl. Math. Comput.* **2017**, *54*, 425–433, doi:10.1007/s12190-016-1016-9.

138. Gao, W.; Wang, Y.; Wang, W.; Shi, L. The First Multiplication Atom-Bond Connectivity Index of Molecular Structures in Drugs. *Saudi Pharm J.* **2017**, *25*, 548–555, doi:10.1016/j.jsps.2017.04.021.
139. Kulli, V.R. Product Connectivity Leap Index and ABC Leap Index of Helm Graphs. *APAM* **2018**, *18*, 189–192, doi:10.22457/apam.v18n2a8.
140. Mondal, S.; De, N.; Pal, A. On Neighborhood Zagreb Index of Product Graphs. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1223*, 129210, doi:10.1016/j.molstruc.2020.129210.
141. Gao, W.; Wang, W. Second Atom-Bond Connectivity Index of Special Chemical Molecular Structures. *J. Chem.* **2014**, *2014*, 1–8, doi:10.1155/2014/906254.
142. Ali, P.; Kirmani, S.A.K.; Al Rugaie, O.; Azam, F. Degree-Based Topological Indices and Polynomials of Hyaluronic Acid-Curcumin Conjugates. *Saudi Pharm J.* **2020**, *28*, 1093–1100, doi:10.1016/j.jsps.2020.07.010.
143. Mondal, S.; De, N.; Pal, A. Topological Indices of Some Chemical Structures Applied for the Treatment of COVID-19 Patients. *Polycycl. Aromat. Compd.* **2022**, *42*, 1220–1234, doi:10.1080/10406638.2020.1770306.
144. Arockiaraj, M.; Clement, J.; Balasubramanian, K. Analytical Expressions for Topological Properties of Polycyclic Benzenoid Networks. *J. Chemom.* **2016**, *30*, 682–697, doi:10.1002/cem.2851.
145. Ghosh, T.; Mondal, S.; Mondal, S.; Mandal, B. Distance Numbers and Wiener Indices of IPR Fullerenes with Formula $C_{10(n-2)}$ ($n \geq 8$) in Analytical Forms. *Chem. Phys. Lett.* **2018**, *701*, 72–80, doi:10.1016/j.cplett.2018.04.039.
146. Arockiaraj, M.; Clement, J.; Paul, D.; Balasubramanian, K. Quantitative Structural Descriptors of Sodalite Materials. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1223*, 128766, doi:10.1016/j.molstruc.2020.128766.
147. Arockiaraj, M.; Clement, J.; Paul, D.; Balasubramanian, K. Relativistic Distance-Based Topological Descriptors of Linde Type A Zeolites and Their Doped Structures with Very Heavy Elements. *Mol. Phys.* **2021**, *119*, e1798529, doi:10.1080/00268976.2020.1798529.
148. Brito, D.; Marquez, E.; Rosas, F.; Rosas, E. Predicting New Potential Antimalarial Compounds by Using Zagreb Topological Indices. *AIP Adv.* **2022**, *12*, 045017, doi:10.1063/5.0089325.
149. Diudea, M.V.; Gutman, I.; Jäntschi, L. *Molecular Topology*; 1st ed.; Nova Science Publishers: Hauppauge, NY, USA, 2001;
150. Park, J.; Moon, J.; Kim, C.; Kang, J.H.; Lim, E.; Park, J.; Lee, K.J.; Yu, S.-H.; Seo, J.-H.; Lee, J.; et al. Graphene Quantum Dots: Structural Integrity and Oxygen Functional Groups for High Sulfur/Sulfide Utilization in Lithium Sulfur Batteries. *NPG Asia Mater* **2016**, *8*, e272–e272, doi:10.1038/am.2016.61.
151. Attanayake, N.H.; Liang, Z.; Wang, Y.; Kaur, A.P.; Parkin, S.R.; Mobley, J.K.; Ewoldt, R.H.; Landon, J.; Odom, S.A. Dual Function Organic Active Materials for Nonaqueous Redox Flow Batteries. *Mater. Adv.* **2021**, *2*, 1390–1401, doi:10.1039/D0MA00881H.
152. Gong, Y.; Gu, L. Degrees of Freedom for Energy Storage Material. *Carbon Energy* **2022**, *4*, 633–644, doi:10.1002/cey2.195.
153. Lang, S.; Yu, S.-H.; Feng, X.; Krumov, M.R.; Abruña, H.D. Understanding the Lithium–Sulfur Battery Redox Reactions via Operando Confocal Raman Microscopy. *Nat Commun* **2022**, *13*, 4811, doi:10.1038/s41467-022-32139-w.
154. Manzi, J.; Paolone, A.; Palumbo, O.; Corona, D.; Massaro, A.; Cavaliere, R.; Muñoz-García, A.B.; Trequattrini, F.; Pavone, M.; Brutti, S. Monoclinic and Orthorhombic NaMnO₂ for Secondary Batteries: A Comparative Study. *Energies* **2021**, *14*, 1230, doi:10.3390/en14051230.
155. Liang, X.; Li, S.; Yang, G.; Wu, X.; Huang, D.; Ning, Y.; Luo, J.; Fang, Z. High Lithium-Ion Conductivity in All-Solid-State Lithium Batteries by Sb Doping LLZO. *Appl. Phys. A* **2022**, *128*, 4, doi:10.1007/s00339-021-05128-x.

156. Ge, L.; Liu, T.; Zhang, Y.; Liu, H. Characterization and Comparison of Organic Functional Groups Effects on Electrolyte Performance for Vanadium Redox Flow Battery. *Front. Chem. Sci. Eng.* **2023**, *17*, 1221–1230, doi:10.1007/s11705-023-2298-8.
157. Zhang, Z.; Gu, Z.; Zhang, C.; Li, J.; Wang, C. Sodium-Ion Capacitors: Recent Development in Electrode Materials. *Batteries & Supercaps* **2021**, *4*, 1680–1700, doi:10.1002/batt.202100042.
158. Tuo, K.; Yin, F.; Mi, F.; Sun, C. Elucidating the Diffusion Pathway of Lithium Ions in Superionic Halide Solid Electrolytes Li₂+Hf₁-In Cl₆ for All-Solid-State Lithium-Metal Based Batteries. *Journal of Energy Chemistry* **2023**, *87*, 12–23, doi:10.1016/j.jechem.2023.08.016.
159. Sun, G.; Yang, D.; Zhang, Z.; Wang, Y.; Lu, W.; Feng, M. Oxygen Vacancy-Rich MoO₃ Nanorods as Photocatalysts for Photo-Assisted Li–O₂ Batteries. *Journal of Advanced Ceramics* **2023**, *12*, 747–759, doi:10.26599/JAC.2023.9220717.
160. Yang, S.; Zhang, S.; Dong, W.; Xia, Y. Purification Mechanism of Microcrystalline Graphite and Lithium Storage Properties of Purified Graphite. *Mater. Res. Express* **2022**, *9*, 025505, doi:10.1088/2053-1591/ac513f.
161. Gazda, M.; Kusz, B.; Płończak, P.; Molin, S.; Jasinski, P. Chemical Interaction between Perovskite La_{0.6}Sr_{0.4}FeO₃ and Super-Ionic Zr_{0.84}Y_{0.16}O_x. *Acta Phys. Pol. A* **2008**, *114*, 135–141, doi:10.12693/APhysPolA.114.135.
162. Metal-Organic Framework MIL-53(Fe) as a Highly Efficient Reusable Catalyst for the Synthesis of 2-Aryl-1H-Benzimidazole. *Chem. Methodol.* **2019**, *3*, 768–776, doi:10.33945/SAMI/CHEMM.2019.6.8.
163. Chen, J.; Lee, P.S. Electrochemical Supercapacitors: From Mechanism Understanding to Multifunctional Applications. *Advanced Energy Materials* **2021**, *11*, 2003311, doi:10.1002/aenm.202003311.
164. Tang, Z.; Wang, S.; Liao, J.; Wang, S.; He, X.; Pan, B.; He, H.; Chen, C. Facilitating Lithium-Ion Diffusion in Layered Cathode Materials by Introducing Li⁺/Ni²⁺ Antisite Defects for High-Rate Li-Ion Batteries. *Research* **2019**, *2019*, 2019/2198906, doi:10.34133/2019/2198906.
165. Kong, F.; Cui, X.; Huang, Y.; Yao, H.; Chen, Y.; Tian, H.; Meng, G.; Chen, C.; Chang, Z.; Shi, J. N-Doped Carbon Electrocatalyst: Marked ORR Activity in Acidic Media without the Contribution from Metal Sites? *Angewandte Chemie* **2022**, *134*, e202116290, doi:10.1002/ange.202116290.
166. Goel, N.; Kushwaha, A.; Kumar, M. Two-Dimensional MXenes: Recent Emerging Applications. *RSC Adv.* **2022**, *12*, 25172–25193, doi:10.1039/D2RA04354H.
167. Ding, Y.; Zhang, C.; Zhang, L.; Zhou, Y.; Yu, G. Molecular Engineering of Organic Electroactive Materials for Redox Flow Batteries. *Chem. Soc. Rev.* **2018**, *47*, 69–103, doi:10.1039/C7CS00569E.
168. Yano, M.; Suzuki, S.; Miyayama, M.; Ohgaki, M. Electrochemical Properties of Layer-Structured H_x(Ni_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3})O₂ for Electrochemical Capacitors in Alkaline Aqueous Solutions. *Journal of Asian Ceramic Societies* **2013**, *1*, 71–76, doi:10.1016/j.jascer.2013.03.006.
169. Kim, J.; Chae, O.B.; Lucht, B.L. Perspective—Structure and Stability of the Solid Electrolyte Interphase on Silicon Anodes of Lithium-Ion Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2021**, *168*, 030521, doi:10.1149/1945-7111/abe984.
170. Zhen, C.; Wu, T.; Chen, R.; Wang, L.; Liu, G.; Cheng, H.-M. Strategies for Modifying TiO₂ Based Electron Transport Layers to Boost Perovskite Solar Cells. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2019**, *7*, 4586–4618, doi:10.1021/acssuschemeng.8b06580.
171. Joița, D.-M.; Tomescu, M.A.; Jäntschi, L. Counting Polynomials in Chemistry: Past, Present, and Perspectives. *Symmetry* **2023**, *15*, 1815, doi:10.3390/sym15101815.
172. Joița, D.-M.; Jäntschi, L. Counting Polynomials in Chemistry II. *International Journal of Topology* **2024**, *1*, 13–26, doi:10.3390/ijt1010003.
173. Hosoya, H. On Some Counting Polynomials in Chemistry. *Discrete Appl. Math.* **1988**, *19*, 239–257, doi:10.1016/0166-218X(88)90017-0.

174. Diudea, M.V. Omega Polynomial in Twisted/Chiral Polyhex Tori. *J. Math. Chem.* **2009**, *45*, 309–315, doi:10.1007/s10910-008-9407-2.
175. Müller, J. On the Multiplicity-Free Actions of the Sporadic Simple Groups. *J. Algebra* **2008**, *320*, 910–926, doi:10.1016/j.jalgebra.2008.01.040.
176. Fujita, S. Symmetry-Itemized Enumeration of Cubane Derivatives as Three-Dimensional Entities by the Fixed-Point Matrix Method of the USCI Approach. *BCSJ* **2011**, *84*, 1192–1207, doi:10.1246/bcsj.20110195.
177. Jäntschi, L.; Bolboacă, S.D. Counting Polynomials. In *New Frontiers in Nanochemistry*; Putz, M.V., Ed.; Apple Academic Press: Includes bibliographical references and indexes. | Contents: Volume 1. Structural nanochemistry – Volume 2. Topological nanochemistry – Volume 3. Sustainable nanochemistry., 2020; pp. 141–148 ISBN 978-0-429-02294-4.
178. Bolboacă, S.-D.; Jäntschi, L. How Good Can the Characteristic Polynomial Be for Correlations? *Int. J. Mol. Sci.* **2007**, *8*, 335–345, doi:10.3390/i8040335.
179. Jäntschi, L.; Bălan, M.C.; Bolboacă, S.-D. Counting Polynomials on Regular Iterative Structures. *Appl. Med. Inform.* **2009**, *24*, 67–95.
180. Mauri, A.; Consonni, V.; Todeschini, R. Molecular Descriptors. In *Handbook of Computational Chemistry*; Leszczynski, J., Kaczmarek-Kedziera, A., Puzyn, T., G. Papadopoulos, M., Reis, H., K. Shukla, M., Eds.; Springer International Publishing: Cham, 2017; pp. 2065–2093 ISBN 978-3-319-27281-8.
181. Gutman, I. Graphs and Graph Polynomials of Interest in Chemistry. In *Graph-Theoretic Concepts in Computer Science*; Tinhofer, G., Schmidt, G., Eds.; Springer: Berlin, Heidelberg, 1987; Vol. 246, pp. 177–187 ISBN 978-3-540-17218-5.
182. Hoffman, K.; Kunze, R.A. *Linear Algebra*; 2d ed.; Prentice-Hall: Englewood Cliffs, N.J, 1971; ISBN 978-0-13-536797-1.
183. Diudea, M.V.; Cigher, S.; Vizitiu, A.E.; Florescu, M.S.; John, P.E. Omega Polynomial and Its Use in Nanostructure Description. *J. Math. Chem.* **2009**, *45*, 316–329, doi:10.1007/s10910-008-9408-1.
184. [Http://L.Academicdirect.Org/Fundamentals/Graphs/Polynomials/](http://L.Academicdirect.Org/Fundamentals/Graphs/Polynomials/).
185. [Https://Www.123calculus.Com/En/Matrix-Permanent-Page-1-35-160.Html](https://Www.123calculus.Com/En/Matrix-Permanent-Page-1-35-160.Html).
186. [Https://Matrixcalc.Org/](https://Matrixcalc.Org/).
187. [Https://Matrix.Reshish.Com/Determinant.Php](https://Matrix.Reshish.Com/Determinant.Php).
188. Rouvray, D.H. Graph Theory in Chemistry. *R. Inst. Chem., Rev.* **1971**, *4*, 173, doi:10.1039/rr9710400173.
189. Rouvray, D.H. The Search for Useful Topological Indices in Chemistry: Topological Indices Promise to Have Far-Reaching Applications in Fields as Diverse as Bonding Theory, Cancer Research, and Drug Design. *Am. Sci.* **1973**, *61*, 729–735.
190. Rask, A.E.; Huntington, L.; Kim, S.; Walker, D.; Wildman, A.; Wang, R.; Hazel, N.; Judi, A.; Pegg, J.T.; Jha, P.K.; et al. Massively Parallel Quantum Chemistry: PFAS on over 1 Million Cloud vCPUs. **2023**, doi:10.48550/ARXIV.2307.10675.
191. Houston, P.L.; Qu, C.; Yu, Q.; Conte, R.; Nandi, A.; Li, J.K.; Bowman, J.M. PESPIP: Software to Fit Complex Molecular and Many-Body Potential Energy Surfaces with Permutationally Invariant Polynomials. *J. Chem. Phys.* **2023**, *158*, 044109, doi:10.1063/5.0134442.
192. Li, Z.; Omidvar, N.; Chin, W.S.; Robb, E.; Morris, A.; Achenie, L.; Xin, H. Machine-Learning Energy Gaps of Porphyrins with Molecular Graph Representations. *J. Phys. Chem. A* **2018**, *122*, 4571–4578, doi:10.1021/acs.jpca.8b02842.
193. Dou, B.; Zhu, Z.; Merkurjev, E.; Ke, L.; Chen, L.; Jiang, J.; Zhu, Y.; Liu, J.; Zhang, B.; Wei, G.-W. Machine Learning Methods for Small Data Challenges in Molecular Science. *Chem. Rev.* **2023**, *123*, 8736–8780, doi:10.1021/acs.chemrev.3c00189.

194. Wang, T.Y.; Neville, S.; Schuurman, M. Machine Learning Seams of Conical Intersection: A Characteristic Polynomial Approach. *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, *14*, 7780–7786, doi:10.1021/acs.jpcllett.3c01649.
195. El-Basil, S. Caterpillar (Gutman) Trees in Chemical Graph Theory. In *Advances in the Theory of Benzenoid Hydrocarbons*; Gutman, I., Cyvin, S.J., Eds.; Topics in Current Chemistry; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 1990; Vol. 153, pp. 273–289 ISBN 978-3-540-51505-0.
196. Knop, J.V.; Trinajstić, N. Chemical Graph Theory. II. On the Graph Theoretical Polynomials of Conjugated Structures. *Int. J. Quantum Chem.* **2009**, *18*, 503–520, doi:10.1002/qua.560180853.
197. Joița, D.-M.; Jäntschi, L. Extending the Characteristic Polynomial for Characterization of C₂₀ Fullerene Congeners. *Mathematics* **2017**, *5*, 84, doi:10.3390/math5040084.
198. King, R.B. Applications of Graph Theory and Topology for the Study of Aromaticity in Inorganic Compounds. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1992**, *32*, 42–47, doi:10.1021/ci00005a007.
199. Santos, J.C.; Andres, J.; Aizman, A.; Fuentealba, P. An Aromaticity Scale Based on the Topological Analysis of the Electron Localization Function Including σ and π Contributions. *J. Chem. Theory Comput.* **2005**, *1*, 83–86, doi:10.1021/ct0499276.
200. Herndon, W.C. Structure-Resonance Theory for Pericyclic Transition States. *J. Chem. Educ.* **1981**, *58*, 371, doi:10.1021/ed058p371.
201. Bruderer, M.; Contreras-Pulido, L.D.; Thaller, M.; Sironi, L.; Obreschkow, D.; Plenio, M.B. Inverse Counting Statistics for Stochastic and Open Quantum Systems: The Characteristic Polynomial Approach. *New J. Phys.* **2014**, *16*, 033030, doi:10.1088/1367-2630/16/3/033030.
202. Arguin, L.-P.; Belius, D.; Bourgade, P. Maximum of the Characteristic Polynomial of Random Unitary Matrices. *Commun. Math. Phys.* **2017**, *349*, 703–751, doi:10.1007/s00220-016-2740-6.
203. Lita Da Silva, J. On the Characteristic Polynomial, Eigenvectors and Determinant of Heptadiagonal Matrices. *Linear and Multilinear Algebra* **2017**, *65*, 1852–1866, doi:10.1080/03081087.2016.1258034.
204. Liu, S.; Zhang, H. On the Characterizing Properties of the Permanental Polynomials of Graphs. *Linear Algebra Appl.* **2013**, *438*, 157–172, doi:10.1016/j.laa.2012.08.026.
205. Ghosh, P.; Mandal, B. Formulas for the Characteristic Polynomial Coefficients of the Pendant Graphs of Linear Chains, Cycles and Stars. *Mol. Phys.* **2014**, *112*, 1021–1029, doi:10.1080/00268976.2013.828108.
206. Ghosh, P.; Klein, D.J.; Mandal, B. Analytical Eigenspectra of Alternant Edge-Weighted Graphs of Linear Chains and Cycles: Some Applications. *Mol. Phys.* **2014**, *112*, 2093–2106, doi:10.1080/00268976.2014.886737.
207. Mondal, S.; Mandal, B. Procedures for Obtaining Characteristic Polynomials of the Kinetic Graphs of Reversible Reaction Networks. *BCSJ* **2018**, *91*, 700–709, doi:10.1246/bcsj.20170381.
208. Mondal, S.; Mandal, B. Sum of Characteristic Polynomial Coefficients of Cycloparaphenylene Graphs as Topological Index. *Mol. Phys.* **2020**, *118*, e1685693, doi:10.1080/00268976.2019.1685693.
209. Gutman, I.; Vidović, D.; Furtula, B. Coulson Function and Hosoya Index. *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *355*, 378–382, doi:10.1016/S0009-2614(02)00291-9.
210. Cash, G.G. Coulson Function and Hosoya Index: Extension of the Relationship to Polycyclic Graphs and to New Types of Matching Polynomials. *J. Math. Chem.* **2005**, *37*, 117–125, doi:10.1007/s10910-004-1444-x.
211. Cash Immanants and Immanantal Polynomials of Chemical Graphs. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2003**, *43*, 1942–1946, doi:10.1021/ci0300238.
212. Trinajstić, N. *Chemical Graph Theory*; 2nd ed.; CRC Press: Boca Raton Florida USA, 1992; ISBN 978-0-8493-4256-1.
213. Hückel, E. Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem: I. Die Elektronenkonfiguration des Benzols und verwandter Verbindungen. *Z. Physik* **1931**, *70*, 204–286, doi:10.1007/BF01339530.

214. Hartree, D.R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* **1928**, *24*, 89–110, doi:10.1017/S0305004100011919.
215. Hartree, D.R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part II. Some Results and Discussion. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* **1928**, *24*, 111–132, doi:10.1017/S0305004100011920.
216. Fock, V. Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Z. Physik* **1930**, *61*, 126–148, doi:10.1007/BF01340294.
217. Fock, V. „Selfconsistent field“ mit Austausch für Natrium. *Z. Physik* **1930**, *62*, 795–805, doi:10.1007/BF01330439.
218. de Laplace, P.S. *Additions Aux Recherches Sur Le Calcul Intégral et Sur Le Système Du Monde*; 1772;
219. Cauchy, A. Sur l'équation à l'aide de laquelle on Détermine Les Inégalités Séculaires Des Mouvements Des Planets. *Exerc. Math* **1829**, *4*, 140–160.
220. Slater, J.C. The Theory of Complex Spectra. *Phys. Rev.* **1929**, *34*, 1293–1322, doi:10.1103/PhysRev.34.1293.
221. Self-Consistent Field, with Exchange, for Beryllium. *Proc. R. Soc. Lond. A* **1935**, *150*, 9–33, doi:10.1098/rspa.1935.0085.
222. Sylvester, J. On the Theorem Connected with Newton's Rule for the Discovery of Imaginary Roots of Equations. *Messenger Math* **1880**, *9*, 71–84.
223. Godsil, C.D.; Gutman, I. On the Theory of the Matching Polynomial. *J. Graph. Theory.* **1981**, *5*, 137–144, doi:10.1002/jgt.3190050203.
224. Godsil, C.D. Algebraic Matching Theory. *Electron. J. Combin.* **1995**, *2*, R8, doi:10.37236/1202.
225. Ramaraj, R.; Balasubramanian, K. Computer Generation of Matching Polynomials of Chemical Graphs and Lattices. *J Comput Chem* **1985**, *6*, 122–141, doi:10.1002/jcc.540060207.
226. Curticapean, R. Counting Matchings of Size k Is $\sharp W[1]$ -Hard. In *Automata, Languages, and Programming*; Fomin, F.V., Freivalds, R., Kwiatkowska, M., Peleg, D., Eds.; Lecture Notes in Computer Science; Springer Berlin Heidelberg 2013; Vol. 7965, pp. 352–363 ISBN 978-3-642-39205-4.
227. Schöning, U. Graph Isomorphism Is in the Low Hierarchy. *Journal of Computer and System Sciences* **1988**, *37*, 312–323, doi:10.1016/0022-0000(88)90010-4.
228. Von Collatz, L.; Sinogowitz, U. Spektren endlicher grafen: Wilhelm Blaschke zum 70. Geburtstag gewidmet. *Abh.Math.Semin.Univ.Hambg.* **1957**, *21*, 63–77, doi:10.1007/BF02941924.
229. Sloane, N.; Plouffe, S. Number of Graphs on n Unlabeled Nodes. *A000088, Formerly M1253 N* **1996**, 479.
230. Weisstein, W. Number of Unique Characteristic Polynomials among All Simple Undirected Graphs on n Nodes. *A082104* **2003**.
231. The IUPAC International Chemical Identifier: *Chemistry International -- Newsmagazine for IUPAC* **2006**, *28*, doi:10.1515/ci.2006.28.6.12.
232. Jäntschi, L.; Bolboacă, S.-D.; Furdui, C.M. Characteristic and Counting Polynomials: Modelling Nonane Isomers Properties. *Molecular Simulation* **2009**, *35*, 220–227, doi:10.1080/08927020802398892.
233. Jäntschi, L. *Characteristic and Counting Polynomials of Nonane Isomers*; Academic Direct Publishing House: Cluj-Napoca, Romania, 2007; ISBN 978-973-86211-3-8.
234. *Sustainable Nanosystems Development, Properties, and Applications*; Putz, M.V., Mirica, M.C., Eds.; Advances in Chemical and Materials Engineering; IGI Global, 2017; ISBN 978-1-5225-0492-4.
235. Bolboacă, S.-D.; Jäntschi, L. Counting Distance and Szeged (on Distance) Polynomials in Dodecahedron Nano-Assemblies. In *Distance, Symmetry, and Topology in Carbon Nanomaterials*; Ashrafi, A.R., Diudea, M.V., Eds.; Springer International Publishing: Cham, 2016; Vol. 9, pp. 391–408 ISBN 978-3-319-31582-9.

236. Jäntschi, L. Online Calculation of Graph Polynomials Such as Counting Polynomial and Characteristic Polynomial. 2006. Available Online: [Http://L.Academidirect.Org/Fundamentals/Graphs/Polynomials/](http://L.Academidirect.Org/Fundamentals/Graphs/Polynomials/) (Accessed on 21 December 2023).
237. Gabor, B.M.; Vreman, P.P. Free Pascal: Open Source Compiler for Pascal and Object Pascal. 1988 (and to Date). Available Online: [Http://Freepascal.Org](http://Freepascal.Org) (Accessed on 21 December 2023).
238. Gutman, I.; Polansky, O.E. Cyclic Conjugation and the Hückel Molecular Orbital Model. *Theoret. Chim. Acta* **1981**, *60*, 203–226, doi:10.1007/BF02394724.
239. Deford, D. *An Application of the Permanent-Determinant Method: Computing the Z-Index of Trees*; Technical Report Series; Washington State University: Pullman, 2013;
240. Cash, G.G. The Permanental Polynomial. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2000**, *40*, 1203–1206, doi:10.1021/ci000031d.
241. Li, W.; Qin, Z.; Zhang, H. Extremal Hexagonal Chains with Respect to the Coefficients Sum of the Permanental Polynomial. *Appl. Math. Comput.* **2016**, *291*, 30–38, doi:10.1016/j.amc.2016.06.025.
242. Li, S.; Wei, W. Extremal Octagonal Chains with Respect to the Coefficients Sum of the Permanental Polynomial. *Appl. Math. Comput.* **2018**, *328*, 45–57, doi:10.1016/j.amc.2018.01.033.
243. Wei, W.; Li, S. Extremal Phenylene Chains with Respect to the Coefficients Sum of the Permanental Polynomial, the Spectral Radius, the Hosoya Index and the Merrifield–Simmons Index. *Discrete Appl. Math.* **2019**, *271*, 205–217, doi:10.1016/j.dam.2019.07.024.
244. Wu, T.; Lai, H.-J. On the Permanental Sum of Graphs. *Appl. Math. Comput.* **2018**, *331*, 334–340, doi:10.1016/j.amc.2018.03.026.
245. Huo, Y.; Liang, H.; Bai, F. An Efficient Algorithm for Computing Permanental Polynomials of Graphs. *Comput. Phys. Commun.* **2006**, *175*, 196–203, doi:10.1016/j.cpc.2006.03.002.
246. Farrell, E.J. An Introduction to Matching Polynomials. *J. Comb. Theory B* **1979**, *27*, 75–86, doi:10.1016/0095-8956(79)90070-4.
247. El-Basil, S. Gutman Trees. Combinatorial–Recursive Relations of Counting Polynomials: Data Reduction Using Chemical Graphs. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* **1986**, *82*, 299–316, doi:10.1039/F29868200299.
248. Gutman, I. The Matching Polynomial. *Commun. Math. Comput. Chem.* **1979**, *6*, 79–91.
249. Deutsch, E.; Klavžar, S. M-Polynomial and Degree-Based Topological Indices. *Iranian J. Math. Chem.* **2015**, *6*, 93–102, doi:10.22052/ijmc.2015.10106.
250. Ghosh, T.; Mondal, S.; Mandal, B. Matching Polynomial Coefficients and the Hosoya Indices of Poly(p-Phenylene) Graphs. *Mol. Phys.* **2018**, *116*, 361–377, doi:10.1080/00268976.2017.1396372.
251. Tian, W.; Zhao, F.; Sun, Z.; Mei, X.; Chen, G. Orderings of a Class of Trees with Respect to the Merrifield–Simmons Index and the Hosoya Index. *J. Comb. Optim.* **2019**, *38*, 1286–1295, doi:10.1007/s10878-019-00447-5.
252. Hosoya, H. Important Mathematical Structures of the Topological Index Z for Tree Graphs. *J. Chem. Inf. Model.* **2007**, *47*, 744–750, doi:10.1021/ci6004756.
253. Hosoya, H. The Most Private Features of the Topological Index. *MATI* **2019**, *1*, 25–33.
254. Plavšić, D.; Šoškić, M.; Landeka, I.; Gutman, I.; Graovac, A. On the Relation between the Path Numbers 1Z , 2Z and the Hosoya Z Index. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1996**, *36*, 1118–1122, doi:10.1021/ci960019e.
255. K. U. Sreeja; P. B. Ramkumar; P. B. Vinodkumar Independence Polynomial And Z Counting Polynomial Of A Fibonacci Tree. *Adv. Appl. Math. Sci.* **2022**, *21*, 1569–1577.
256. Wang, Yan-Feng; Ma, Ning Orderings a Class of Unicyclic Graphs with Respect to Hosoya and Merrifield–Simmons Index. *Sains Malaysiana* **2016**, *45*, 55–58.
257. Huang, Y.; Shi, L.; Xu, X. The Hosoya Index and the Merrifield–Simmons Index. *J. Math. Chem.* **2018**, *56*, 3136–3146, doi:10.1007/s10910-018-0937-y.

258. Andriantiana, E.O.D.; Wagner, S. On the Number of Independent Subsets in Trees with Restricted Degrees. *Math. Comput. Model.* **2011**, *53*, 678–683, doi:10.1016/j.mcm.2010.10.003.
259. Gutman, I.; Hosoya, H.; Babić, D. Topological Indices and Graph Polynomials of Some Macrocyclic Belt-Shaped Molecules. *Faraday Trans.* **1996**, *92*, 625, doi:10.1039/ft9969200625.
260. Gutman, I.; Hosoya, H. Molecular Graphs with Equal Z-Counting and Independence Polynomials. *Z. Naturforschung A* **1990**, *45*, 645–648, doi:10.1515/zna-1990-0509.
261. Mohar, B. The Laplacian Spectrum of Graphs. In *Graph theory, combinatorics, algorithms, and applications*; Alavi, Y., Ed.; Society for Industrial and Applied Mathematics: Philadelphia, 1991; Vol. 2, pp. 871–898 ISBN 978-0-89871-287-2.
262. Trinajstić, N.; Babić, D.; Nikolic, S.; Plavšić, D.; Amić, D.; Mihalic, Z. The Laplacian Matrix in Chemistry. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 368–376, doi:10.1021/ci00018a023.
263. Fath-Tabar, G. Zagreb Polynomial and PI Indices of Some Nano Structures. *Dig. J. Nanomater. Bios.* **2009**, *4*, 189–191.
264. Poojary, P.; Raghavendra, A.; Shenoy, B.G.; Farahani, M.R.; Sooryanarayana, B. Certain Topological Indices and Polynomials for the Isaac Graphs. *J. Discrete Math. Sci. Cryptogr.* **2021**, *24*, 511–525, doi:10.1080/09720529.2021.1896648.
265. Farahani, M.R. First and Second Zagreb Polynomials of $VC_5C_7[p,q]$ and $HC_5C_7[p,q]$ Nanotubes. *ILCPA* **2014**, *31*, 56–62, doi:10.18052/www.scipress.com/ILCPA.31.56.
266. Gao, W.; Siddiqui, M.K.; Rehman, N.A.; Muhammad, M.H. Topological Characterization of Dendrimer, Benzenoid, and Nanocone. *Z. Naturforschung C* **2018**, *74*, 35–43, doi:10.1515/znc-2018-0153.
267. Gao, W.; Farahani, M.R. The Zagreb Topological Indices for a Type of Benzenoid Systems Jagged-Rectangle. *J. Interdiscip. Math.* **2017**, *20*, 1341–1348, doi:10.1080/09720502.2016.1232037.
268. Gutman, I.; Furtula, B.; Balaban, A.T. Algorithm For Simultaneous Calculation Of Kekulé And Clar Structure Counts, And Clar Number Of Benzenoid Molecules. *Polycycl. Aromat. Compd.* **2006**, *26*, 17–35, doi:10.1080/10406630500501435.
269. Gutman, I.; Borovičanić, B. Zhang – Zhang Polynomial of Multiple Linear Hexagonal Chains. *Z. Naturforschung A* **2006**, *61*, 73–77, doi:10.1515/zna-2006-1-211.
270. Aihara, J. Aromatic Sextets and Aromaticity in Benzenoid Hydrocarbons. *BCSJ* **1977**, *50*, 2010–2012, doi:10.1246/bcsj.50.2010.
271. Shiu, W.C.; Lam, P.C.B.; Zhang, F.; Zhang, H. Normal Components, Kekulé Patterns, and Clar Patterns in Plane Bipartite Graphs. *J. Math. Chem.* **2002**, *31*, 405–420, doi:10.1023/A:1021072722165.
272. Diudea, M.V.; Vizitiu, A.E.; Janežič, D. Cluj and Related Polynomials Applied in Correlating Studies. *J. Chem. Inf. Model.* **2007**, *47*, 864–874, doi:10.1021/ci600482j.
273. Gutman, I.; Harary, F. Generalizations of the Matching Polynomial. *Util. Math.* **1983**, *24*, 97–106.
274. Levit, V.E.; Mandrescu, E. Independence Polynomials of Well-Covered Graphs: Generic Counterexamples for the Unimodality Conjecture. *Eur. J. Comb.* **2006**, *27*, 931–939, doi:10.1016/j.ejc.2005.04.007.
275. Song, L.; Staton, W.; Wei, B. Independence Polynomials of K-Tree Related Graphs. *Discrete Appl. Math.* **2010**, *158*, 943–950, doi:10.1016/j.dam.2010.01.002.
276. Fisher, D.C.; Solow, A.E. Dependence Polynomials. *Discrete Math.* **1990**, *82*, 251–258, doi:10.1016/0012-365X(90)90202-S.
277. Hoede, C.; Li, X. Clique Polynomials and Independent Set Polynomials of Graphs. *Discrete Math.* **1994**, *125*, 219–228, doi:10.1016/0012-365X(94)90163-5.
278. Motoyama, A.; Hosoya, H. King and Domino Polynomials for Polyomino Graphs. *J. Math. Phys.* **1977**, *18*, 1485–1490, doi:10.1063/1.523411.

279. Balasubramanian, K. Exhaustive Generation and Analytical Expressions of Matching Polynomials of Fullerenes C₂₀-C₅₀. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 421–427, doi:10.1021/ci00018a032.
280. Balasubramanian, K.; Ramaraj, R. Computer Generation of King and Color Polynomials of Graphs and Lattices and Their Applications to Statistical Mechanics. *J. Comput. Chem.* **1985**, *6*, 447–454, doi:10.1002/jcc.540060513.
281. Diudea, M.V. Omega Polynomial. *Carpathian J. Math.* **2006**, *22*, 43–47.
282. Kanna, M.R.R.; Kumar, R.P.; Jamil, M.K.; Farahani, M.R. Omega and Cluj-Ilmenau Indices of Hydrocarbon Molecules “Polycyclic Aromatic Hydrocarbons PAHk.” *Comput. Chem.* **2016**, *04*, 91–96, doi:10.4236/cc.2016.44009.
283. Diudea, M.V.; Vizitiu, A.E.; Mirzagar, M.; Ashrafi, A.R. Sadhana Polynomial in Nano-Dendrimers. *Carpathian J. Math.* **2010**, *26*, 59–66.
284. Iqbal, M.A.; Imran, M.; Zaighum, M.A. Eccentricity Based Topological Indices of Siloxane and POPAM Dendrimers. *Main Group Met. Chem.* **2020**, *43*, 92–98, doi:10.1515/mgmc-2020-0010.
285. Ohkami, N.; Hosoya, H. Wheland Polynomial. I. Graph-Theoretical Analysis of the Contribution of the Excited Resonance Structures to the Ground State of Acyclic Polyenes. *BCSJ* **1979**, *52*, 1624–1633, doi:10.1246/bcsj.52.1624.
286. Randić, M. In Search of Structural Invariants. *J Math Chem* **1992**, *9*, 97–146, doi:10.1007/BF01164840.
287. Farrell, E.J. On a General Class of Graph Polynomials. *J. Comb. Theory B* **1979**, *26*, 111–122, doi:10.1016/0095-8956(79)90049-2.
288. Gutman, I. Difficulties with Topological Resonance Energy. *Chem. Phys. Lett.* **1979**, *66*, 595–597, doi:10.1016/0009-2614(79)80348-6.
289. Farrell, E.J.; Wahid, S.A. Some General Classes of Comatching Graphs. *Int. J. Math. Sci.* **1987**, *10*, 519–524, doi:10.1155/S0161171287000619.
290. Radenković, S.; Đurđević, J.; Gutman, I. Quantitative Study of the PCP Effect. *Chem. Phys. Lett.* **2009**, *475*, 289–292, doi:10.1016/j.cplett.2009.05.056.
291. Gutman, I. General Theory of Cycle-Dependence of Total Pi-Electron Energy. *Iranian J. Math. Chem.* **2018**, *9*, 9–16, doi:10.22052/ijmc.2017.83263.1285.
292. Alsharafi, M.S.Y.; Alameri, A.Q. The F-Index and Coindex of V-Phenylenic Nanotubes and Nanotorus and Their Molecular Complement Graphs. *Nanosystems: Phys. Chem. Math.* **2021**, *12*, 263–270, doi:10.17586/2220-8054-2021-12-3-263-270.
293. Kauffman, L.H. An Invariant of Regular Isotopy. *Trans. Amer. Math. Soc.* **1990**, *318*, 417–471, doi:10.1090/S0002-9947-1990-0958895-7.
294. Salman, M.; Ali, F.; Masood Ur Rehman; Khalid, I. Some Valency Oriented Molecular Invariants of Certain Networks. *CCHTS* **2022**, *25*, 462–475, doi:10.2174/1386207323666201020145239.
295. Ahila Jeyanthi, D.; M. Selvarajan, T. Enhanced Mesh Network Using Novel Forgotten Polynomial Algorithm for Pharmaceutical Design. *Intell. Autom. Soft Comput.* **2022**, *33*, 669–680, doi:10.32604/iasc.2022.022187.
296. Zhang, H.-P.; Zhang, F. The Clar Covering Polynomial of Hexagonal Systems I. *Discrete Appl. Math.* **1996**, *69*, 147–167, doi:10.1016/0166-218X(95)00081-2.
297. Rosenfeld, V.R. The Cycle (Circuit) Polynomial of a Graph with Double and Triple Weights of Edges and Cycles. *ejgta* **2019**, *7*, 189–205, doi:10.5614/ejgta.2019.7.1.15.
298. Awan, J.; Bernardi, O. Tutte Polynomials for Directed Graphs. *J. Comb. Theory B* **2020**, *140*, 192–247, doi:10.1016/j.jctb.2019.05.006.

299. Aihara, J. Resonance Energies of Benzenoid Hydrocarbons. *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 2048–2053, doi:10.1021/ja00449a006.
300. Li, X.; Zhao, H.; Wang, L. A Complete Solution to a Conjecture on the β -Polynomials of Graphs. *J. Math. Chem.* **2003**, *33*, 189–193, doi:10.1023/A:1024738623798.
301. Mizoguchi, N. Unified Rule for Stability of Hueckel-Type and Moebius-Type Systems. *J. Phys. Chem.* **1988**, *92*, 2754–2756, doi:10.1021/j100321a012.
302. Herges, R. Topology in Chemistry: Designing Möbius Molecules. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4820–4842, doi:10.1021/cr0505425.
303. Gutman, I. Cycle Energy and Its Size Dependence. *Discrete Appl. Math.* **2020**, *284*, 534–537, doi:10.1016/j.dam.2020.04.015.
304. Heilbronner, E. Some More Difficulties with Topological Resonance Energy. *Chemical Physics Letters* **1982**, *85*, 377–380, doi:10.1016/0009-2614(82)83476-3.
305. Gutman, I.; Mohar, B. More Difficulties with Topological Resonance Energy. *Chemical Physics Letters* **1981**, *77*, 567–570, doi:10.1016/0009-2614(81)85208-6.
306. Nikolić, S.; Randić, M.; Klein, D.J.; Plavšić, D.; Trinajstić, N. The Conjugated-Circuit Model: Application to Benzenoid Hydrocarbons. *Journal of Molecular Structure* **1989**, *198*, 223–237, doi:10.1016/0022-2860(89)80041-9.
307. Rosenfeld, V.R.; Klein, D.J. Enumeration of Substitutional Isomers with Restrictive Mutual Positions of Ligands: I. Overall Counts. *J Math Chem* **2013**, *51*, 21–37, doi:10.1007/s10910-012-0056-0.
308. Rosenfeld, V.R. The Circuit Polynomial of the Restricted Rooted Product $G(\Gamma)$ of Graphs with a Bipartite Core G . *Discrete Applied Mathematics* **2008**, *156*, 500–510, doi:10.1016/j.dam.2006.06.015.
309. Zhang, J. An Introduction to Chromatic Polynomials. **2018**.
310. Perrett, T. Chromatic Polynomial Calculator. Available online: <https://tjperr.github.io/chromatic-polynomial/> (accessed on 14 October 2024).
311. Farrell, E.J.; Rosenfeld, V.R. Block and Articulation Node Polynomials of the Generalized Rooted Product of Graphs. *J. Math. Sci.* **2000**, *10*, 35–47.
312. Bollobas, B.; Gehring, F.W.; Halmos, P.R. *Modern Graph Theory*; Springer: New York, NY, 2013; ISBN 978-1-4612-0619-4.
313. Tutte, W.T. A Contribution to the Theory of Chromatic Polynomials. *Can. j. math.* **1954**, *6*, 80–91, doi:10.4153/CJM-1954-010-9.
314. Chbili, N.; Alderai, N.; Ali, R.; AlQedra, R. Tutte Polynomials and Graph Symmetries. *Symmetry* **2022**, *14*, 2072, doi:10.3390/sym14102072.
315. Hubai, T. *The Chromatic Polynomial*, Eotvos Lorand University: Budapest, 2009.
316. Ellis-Monaghan, J.A.; Merino, C. Graph Polynomials and Their Applications I: The Tutte Polynomial. In *Structural Analysis of Complex Networks*; Dehmer, M., Ed.; Birkhäuser Boston: Boston, 2011; pp. 219–255 ISBN 978-0-8176-4788-9.
317. Farr, G.; Oxley, J. The Contributions of W.T. Tutte to Matroid Theory. In *2017 MATRIX Annals*; De Gier, J., Praeger, C.E., Tao, T., Eds.; MATRIX Book Series; Springer International Publishing: Cham, 2019; Vol. 2, pp. 343–361 ISBN 978-3-030-04160-1.
318. Younger, D.H. William Thomas Tutte. 14 May 1917 – 2 May 2002. *Biogr. Mem. Fell. R. Soc.* **2012**, *58*, 283–297, doi:10.1098/rsbm.2012.0036.
319. Nafaa, C. *Graph Polynomials and Symmetries* 2018.
320. Björklund, A.; Husfeldt, T.; Kaski, P.; Koivisto, M. Computing the Tutte Polynomial in Vertex-Exponential Time. In *Proceedings of the 2008 49th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*; IEEE: Philadelphia, PA, USA, October 2008; pp. 677–686.

321. Fath-Tabar, G.; Gholam-Rezaei, Z.; Ashrafi, A.R. On the Tutte Polynomial of Benzenoid Chains. *Iranian J. Math. Chem.* **2012**, *3*, doi:10.22052/ijmc.2012.5229.
322. Cadavid Muñoz, J.J. Using Tutte Polynomials to Analyze the Structure of the Benzodiazepines.; Szu, H.H., Dai, L., Eds.; Baltimore, Maryland, USA, May 22 2014; p. 911815.
323. Gong, H.; Jin, X.; Zhang, F. Tutte Polynomials for Benzenoid Systems with One Branched Hexagon. *J Math Chem* **2016**, *54*, 1057–1071, doi:10.1007/s10910-016-0601-3.
324. Gong, H.; Jin, X.; Zhang, F. Erratum to: Tutte Polynomials for Benzenoid Systems with One Branched Hexagon. *J Math Chem* **2016**, *54*, 1748–1749, doi:10.1007/s10910-016-0662-3.
325. Ren, H.; Xu, D.; Yang, W. The Tutte Polynomials of Catacondensed Benzenoid Systems. *J Math Chem* **2021**, *59*, 529–541, doi:10.1007/s10910-020-01205-3.
326. Ma, T.; Jin, X.; Zhang, F. Tutte Polynomials of Fan-like Graphs with Applications in Benzenoid Systems. *Applied Mathematics and Computation* **2021**, *411*, 126496, doi:10.1016/j.amc.2021.126496.
327. Chen, H.; Guo, Q. Tutte Polynomials of Alternating Polycyclic Chains. *J Math Chem* **2019**, *57*, 2248–2260, doi:10.1007/s10910-019-01069-2.
328. Chen, H.; Li, C. The Tutte Polynomial of Phenylene Systems with given Number of Branching Hexagons. *Int J of Quantum Chemistry* **2022**, *122*, e26959, doi:10.1002/qua.26959.
329. Chen, H. Tutte Polynomials for Some Chemical Polycyclic Graphs. *J Math Chem* **2023**, doi:10.1007/s10910-023-01516-1.
330. Dehmer, M.; Mueller, L.A.J.; Graber, A. New Polynomial-Based Molecular Descriptors with Low Degeneracy. *PLoS ONE* **2010**, *5*, e11393, doi:10.1371/journal.pone.0011393.
331. Dehmer, M.; Chen, Z.; Emmert-Streib, F.; Mowshowitz, A.; Varmuza, K.; Feng, L.; Jodlbauer, H.; Shi, Y.; Tao, J. The Orbit-Polynomial: A Novel Measure of Symmetry in Networks. *IEEE Access* **2020**, *8*, 36100–36112, doi:10.1109/ACCESS.2020.2970059.
332. Rosenfeld, V.R.; Diudea, M.V. The Block–Polynomials and Block–Spectra of Dendrimers. *Internet Electron. J. Mol. Des.* **2002**, *1*, 142–156.
333. Zhang, H.-P. The Clar Covering Polynomials of S,T-Isomers. *MATCH* **1993**, *29*, 189–197.
334. Zhang, H.-P. The Clar Covering Polynomial of Hexagonal Systems with an Application to Chromatic Polynomials. *Discrete Mathematics* **1997**, *172*, 163–173, doi:10.1016/S0012-365X(96)00279-8.
335. Fu-Ji, Z.; He-Ping, Z.; Yu-Ting, L. The Clar Covering Polynomial of Hexagonal Systems II. An Application to Resonance Energy of Condensed Aromatic Hydrocarbons. *Chin. J. Chem.* **2010**, *14*, 321–325, doi:10.1002/cjoc.19960140407.
336. Witek, H.A.; Kang, J.-S. ZZ Polynomials for Isomers of (5,6)-Fullerenes C_n with $n = 20–50$. *Symmetry* **2020**, *12*, 1483, doi:10.3390/sym12091483.
337. Li, P.; Bian, H.; Yu, H.; Dou, Y. Clar Covering Polynomials of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *MATH* **2024**, *9*, 13385–13409, doi:10.3934/math.2024653.
338. Klein, D.J.; Rosenfeld, V. Forcing, Freedom, & Uniqueness in Graph Theory & Chemistry. *Croat. Chem. Acta* **2014**, *87*, 49–59, doi:10.5562/cca2000.
339. Zhao, S.; Zhang, H. Forcing Polynomials of Benzenoid Parallelogram and Its Related Benzenoids. *Applied Mathematics and Computation* **2016**, *284*, 209–218, doi:10.1016/j.amc.2016.03.008.
340. Deng, K.; Zhang, H. Anti-Forcing Spectrum of Any Cata-Condensed Hexagonal System Is Continuous. *Front. Math. China* **2017**, *12*, 325–337, doi:10.1007/s11464-016-0605-0.
341. Zhao, S.; Zhang, H. Anti-Forcing Polynomials for Benzenoid Systems with Forcing Edges. *Discrete Applied Mathematics* **2018**, *250*, 342–356, doi:10.1016/j.dam.2018.05.023.

342. Zhao, S.; Zhang, H. Forcing and Anti-Forcing Polynomials of Perfect Matchings for Some Rectangle Grids. *J Math Chem* **2019**, *57*, 202–225, doi:10.1007/s10910-018-0944-z.
343. Zhao, S. Matching Forcing Polynomials of Constructable Hexagonal Systems. *Match* **2022**, *88*, 767–797, doi:10.46793/match.88-3.767Z.
344. Zhao, S.; Fan, X. Forcing Polynomial of Double Hexagonal Chains. *Polycyclic Aromatic Compounds* **2023**, *43*, 4055–4069, doi:10.1080/10406638.2022.2083193.
345. Zhao, S. Matching Anti-Forcing Polynomials of Catacondensed Hexagonal Systems. *Discrete Applied Mathematics* **2023**, *337*, 54–67, doi:10.1016/j.dam.2023.04.017.
346. Deng, K.; Liu, S.; Zhou, X. Forcing and Anti-Forcing Polynomials of Perfect Matchings of a Pyrene System. *MATCH* **2021**, *85*, 27–46.
347. Deng, K.; Lü, H.; Wu, T. Forcing and Anti-Forcing Polynomials of a Type of Polyomino Graphs. *Comp. Appl. Math.* **2023**, *42*, 91, doi:10.1007/s40314-023-02228-7.
348. Joița, D.-M.; Tomescu, M.A.; Bălint, D.; Jäntschi, L. An Application of the Eigenproblem for Biochemical Similarity. *Symmetry* **2021**, *13*, 1849, doi:10.3390/sym13101849.
349. Huang, S.; Cole, J.M. A Database of Battery Materials Auto-Generated Using ChemDataExtractor. *Sci Data* **2020**, *7*, 260, doi:10.1038/s41597-020-00602-2.
350. Battery Data Available online: <https://www.materialsforbatteries.org/data/>.
351. Dong, R.; Pan, S.; Peng, Z.; Zhang, Y.; Yang, J. mTM-Align: A Server for Fast Protein Structure Database Search and Multiple Protein Structure Alignment. *Nucleic Acids Research* **2018**, 380–386, doi:10.1093/nar/gky430.
352. Kolodny, R.; Koehl, P.; Levitt, M. Comprehensive Evaluation of Protein Structure Alignment Methods: Scoring by Geometric Measures. *J. Mol. Biology* **2005**, *346*, 1173–1188, doi:10.1016/j.jmb.2004.12.032.
353. Terashi, G.; Takeda-Shitaka, M. CAB-Align: A Flexible Protein Structure Alignment Method Based on the Residue-Residue Contact Area. *PLoS ONE* **2015**, *10*, e0141440, doi:10.1371/journal.pone.0141440.
354. Akdel, M.; Durairaj, J.; de Ridder, D.; van Dijk, A.D.J. Caretta – A Multiple Protein Structure Alignment and Feature Extraction Suite. *Computational and Structural Biotechnology Journal* **2020**, *18*, 981–992, doi:10.1016/j.csbj.2020.03.011.
355. Holm, L. Using Dali for Protein Structure Comparison. In *Structural Bioinformatics*; Gáspári, Z., Ed.; Methods in Molecular Biology; Springer US: New York, NY, 2020; Vol. 2112, pp. 29–42 ISBN 978-1-07-160269-0.
356. Hu, J.; Liu, Z.; Yu, D.-J.; Zhang, Y. LS-Align: An Atom-Level, Flexible Ligand Structural Alignment Algorithm for High-Throughput Virtual Screening. *Bioinformatics* **2018**, *34*, 2209–2218, doi:10.1093/bioinformatics/bty081.
357. Menke, M.; Berger, B.; Cowen, L. Matt: Local Flexibility Aids Protein Multiple Structure Alignment. *PLoS Comput Biol* **2008**, *4*, 88–99, doi:10.1371/journal.pcbi.0040010.
358. Zhang, Y. TM-Align: A Protein Structure Alignment Algorithm Based on the TM-Score. *Nucleic Acids Research* **2005**, *33*, 2302–2309, doi:10.1093/nar/gki524.
359. Chen, W.; Yao, C.; Guo, Y.; Wang, Y.; Xue, Z. pmTM-Align: Scalable Pairwise and Multiple Structure Alignment with Apache Spark and OpenMP. *BMC Bioinformatics* **2020**, *21*, 426, doi:10.1186/s12859-020-03757-2.
360. Shegay, M.V.; Suplatov, D.A.; Popova, N.N.; Švedas, V.K.; Voevodin, V.V. parMATT: Parallel Multiple Alignment of Protein 3D-Structures with Translations and Twists for Distributed-Memory Systems. *Bioinformatics* **2019**, *35*, 4456–4458, doi:10.1093/bioinformatics/btz224.

361. Dong, R.; Peng, Z.; Zhang, Y.; Yang, J. mTM-Align: An Algorithm for Fast and Accurate Multiple Protein Structure Alignment. *Bioinformatics* **2018**, *34*, 1719–1725, doi:10.1093/bioinformatics/btx828.
362. Holm, L. DALI and the Persistence of Protein Shape. *Protein Science* **2020**, *29*, 128–140, doi:10.1002/pro.3749.
363. Jäntschi, L. The Eigenproblem Translated for Alignment of Molecules. *Symmetry* **2019**, *11*, 1027, doi:10.3390/sym11081027.
364. Huang, J.; Zhang, M.; Ma, J.; Liu, X.; Kobbelt, L.; Bao, H. Spectral Quadrangulation with Orientation and Alignment Control. In Proceedings of the ACM SIGGRAPH Asia 2008 papers; ACM: Singapore, December 2008; pp. 1–9.
365. Abdelmoumen Norrdine An Algebraic Solution to the Multilateration Problem. **2015**, *Unpublished*, doi:10.13140/RG.2.1.1681.3602.
366. Zhao, C.; Sacan, A. UniAlign: Protein Structure Alignment Meets Evolution. *Bioinformatics* **2015**, *31*, 3139–3146, doi:10.1093/bioinformatics/btv354.
367. Xu, Z.; Huang, X.; Jimenez, F.; Deng, Y. A New Record of Graph Enumeration Enabled by Parallel Processing. *Mathematics* **2019**, *7*, 1214, doi:10.3390/math7121214.
368. Medina, L.; Nina, H.; Trigo, M. On Distance Signless Laplacian Spectral Radius and Distance Signless Laplacian Energy. *Mathematics* **2020**, *8*, 792, doi:10.3390/math8050792.
369. Hayat, S.; Khan, S.; Khan, A.; Liu, J.-B. Valency-Based Molecular Descriptors for Measuring the π - Electronic Energy of Lower Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Polycyclic Aromatic Compounds* **2022**, *42*, 1113–1129, doi:10.1080/10406638.2020.1768414.
370. Hayat, S.; Khan, S. Quality Testing of Spectrum-Based Valency Descriptors for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Applications. *Journal of Molecular Structure* **2021**, *1228*, 129789, doi:10.1016/j.molstruc.2020.129789.
371. Tomescu, M.A.; Jäntschi, L.; Rotaru, D.I. Figures of Graph Partitioning by Counting, Sequence and Layer Matrices. *Mathematics* **2021**, *9*, 1419, doi:10.3390/math9121419.
372. Abd-Rabo, M.A.; Zakarya, M.; Cesarano, C.; Aly, S. Bifurcation Analysis of Time-Delay Model of Consumer with the Advertising Effect. *Symmetry* **2021**, *13*, 417, doi:10.3390/sym13030417.
373. Jukic, S.; Saracevic, M.; Subasi, A.; Kevric, J. Comparison of Ensemble Machine Learning Methods for Automated Classification of Focal and Non-Focal Epileptic EEG Signals. *Mathematics* **2020**, *8*, 1481, doi:10.3390/math8091481.
374. Zhang, C.; Pei, D. Generalized Bertrand Curves in Minkowski 3-Space. *Mathematics* **2020**, *8*, 2199, doi:10.3390/math8122199.
375. Tirkolaei, E.B.; Dashtian, Z.; Weber, G.-W.; Tomaskova, H.; Soltani, M.; Mousavi, N.S. An Integrated Decision-Making Approach for Green Supplier Selection in an Agri-Food Supply Chain: Threshold of Robustness Worthiness. *Mathematics* **2021**, *9*, 1304, doi:10.3390/math9111304.
376. Wei, Y.; Zheng, Y.; Jiang, Z.; Shon, S. A Study of Determinants and Inverses for Periodic Tridiagonal Toeplitz Matrices with Perturbed Corners Involving Mersenne Numbers. *Mathematics* **2019**, *7*, 893, doi:10.3390/math7100893.
377. Pei, J.-T.; Bai, Y.-S. Lie Symmetries, Conservation Laws and Exact Solutions for Jaulent-Miodek Equations. *Symmetry* **2019**, *11*, 1319, doi:10.3390/sym11101319.
378. Gasiński, L.; Papageorgiou, N.S. Resonant Anisotropic (p,q)-Equations. *Mathematics* **2020**, *8*, 1332, doi:10.3390/math8081332.
379. Moaaz, O.; Furuichi, S.; Muhib, A. New Comparison Theorems for the Nth Order Neutral Differential Equations with Delay Inequalities. *Mathematics* **2020**, *8*, 454, doi:10.3390/math8030454.

380. Kamran, K.; Shah, Z.; Kumam, P.; Alreshidi, N.A. A Meshless Method Based on the Laplace Transform for the 2D Multi-Term Time Fractional Partial Integro-Differential Equation. *Mathematics* **2020**, *8*, 1972, doi:10.3390/math8111972.
381. Sharma, J.R.; Kumar, S.; Jäntschi, L. On a Class of Optimal Fourth Order Multiple Root Solvers without Using Derivatives. *Symmetry* **2019**, *11*, 1452, doi:10.3390/sym11121452.
382. Kumar, D.; Sharma, J.R.; Jäntschi, L. A Novel Family of Efficient Weighted-Newton Multiple Root Iterations. *Symmetry* **2020**, *12*, 1494, doi:10.3390/sym12091494.
383. Randić, M.; Barysz, M.; Nowakowski, J.; Nikolić, S.; Trinajstić, N. Isospectral Graphs Revisited. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM* **1989**, *185*, 95–121, doi:10.1016/0166-1280(89)85008-0.
384. Jiang, Y.; Liang, C. On Endospectral Bipartite Graphs. *Croat. Chem. Acta* **1995**, *68*, 343–357.
385. *The Unitary Group for the Evaluation of Electronic Energy Matrix Elements*; Hinze, J., Ed.; Lecture Notes in Chemistry; Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 1981; Vol. 22; ISBN 978-3-540-10287-8.
386. Heidar-Zadeh, F.; Ayers, P.W.; Verstraelen, T.; Vinogradov, I.; Vöhringer-Martinez, E.; Bultinck, P. Information-Theoretic Approaches to Atoms-in-Molecules: Hirshfeld Family of Partitioning Schemes. *J. Phys. Chem. A* **2018**, *122*, 4219–4245, doi:10.1021/acs.jpca.7b08966.
387. Chen, X.; Liu, M.; Gao, J. CARNOT: A Fragment-Based Direct Molecular Dynamics and Virtual-Reality Simulation Package for Reactive Systems. *J. Chem. Theory Comput.* **2022**, *18*, 1297–1313, doi:10.1021/acs.jctc.1c01032.
388. Feher, M.; Schmidt, J.M. Fuzzy Clustering as a Means of Selecting Representative Conformers and Molecular Alignments. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2003**, *43*, 810–818, doi:10.1021/ci0200671.
389. Sastry, G.M.; Dixon, S.L.; Sherman, W. Rapid Shape-Based Ligand Alignment and Virtual Screening Method Based on Atom/Feature-Pair Similarities and Volume Overlap Scoring. *J. Chem. Inf. Model.* **2011**, *51*, 2455–2466, doi:10.1021/ci2002704.
390. Jäntschi, L. Structure-Property Relationships for Solubility of Monosaccharides. *Appl Water Sci* **2019**, *9*, 38, doi:10.1007/s13201-019-0912-1.
391. Janežič, D.; Jäntschi, L.; Bolboacă, S.-D. Sugars and Sweeteners: Structure, Properties and In Silico Modeling. *CMC* **2020**, *27*, 5–22, doi:10.2174/0929867325666180926144401.
392. Schaeffer, S.E. Graph Clustering. *Computer Science Review* **2007**, *1*, 27–64, doi:10.1016/j.cosrev.2007.05.001.
393. Kanj, I.; Komusiewicz, C.; Sorge, M.; van Leeuwen, E.J. Parameterized Algorithms for Recognizing Monopolar and 2-Subcolorable Graphs. *Journal of Computer and System Sciences* **2018**, *92*, 22–47, doi:10.1016/j.jcss.2017.08.002.
394. Ahmadi, R.; Nami, S. Investigation of Entanglement Entropy in Cyclic Bipartite Graphs Using Computer Software. *Pramana - J Phys* **2021**, *95*, 39, doi:10.1007/s12043-020-02041-5.
395. Hosseinian, S.; Butenko, S. Polyhedral Properties of the Induced Cluster Subgraphs. *Discrete Appl. Math.* **2021**, *297*, 80–96, doi:10.1016/j.dam.2021.02.040.
396. Nakamura, K.; Araki, T. Partitioning Vertices into In- and out-Dominating Sets in Digraphs. *Discrete Appl. Math.* **2020**, *285*, 43–54, doi:10.1016/j.dam.2020.05.021.
397. Barbato, M.; Bezzi, D. Monopolar Graphs: Complexity of Computing Classical Graph Parameters. *Discrete Appl. Math.* **2021**, *291*, 277–285, doi:10.1016/j.dam.2020.12.023.
398. Füredi, Z.; Jiang, T.; Kostochka, A.; Mubayi, D.; Verstraëte, J. Partitioning Ordered Hypergraphs. *J. Comb. Theory A* **2021**, *177*, 105300, doi:10.1016/j.jcta.2020.105300.
399. Hellmann, T. Pairwise Stable Networks in Homogeneous Societies with Weak Link Externalities. *European Journal of Operational Research* **2021**, *291*, 1164–1179, doi:10.1016/j.ejor.2020.09.025.

400. McDiarmid, C.; YOLOV, N. Recognition of Unipolar and Generalised Split Graphs. *Algorithms* **2015**, *8*, 46–59, doi:10.3390/a8010046.
401. Golubic, M.C.; Lewenstein, M. New Results on Induced Matchings. *Discrete Appl. Math.* **2000**, *101*, 157–165, doi:10.1016/S0166-218X(99)00194-8.
402. Hosoya, H.; Motoyama, A. An Effective Algorithm for Obtaining Polynomials for Dimer Statistics. Application of Operator Technique on the Topological Index to Two- and Three-dimensional Rectangular and Torus Lattices. *J. Math. Phys.* **1985**, *26*, 157–167, doi:10.1063/1.526778.
403. Eschen, E.M.; Wang, X. Algorithms for Unipolar and Generalized Split Graphs. *Discrete Appl. Math.* **2014**, *162*, 195–201, doi:10.1016/j.dam.2013.08.011.
404. Adoni, W.Y.H.; Nahhal, T.; Krichen, M.; El byed, A.; Assayad, I. DHPV: A Distributed Algorithm for Large-Scale Graph Partitioning. *J Big Data* **2020**, *7*, 76, doi:10.1186/s40537-020-00357-y.
405. Zhang, T.; Gao, Y.; Zheng, B.; Chen, L.; Wen, S.; Guo, W. Towards Distributed Node Similarity Search on Graphs. *World Wide Web* **2020**, *23*, 3025–3053, doi:10.1007/s11280-020-00819-6.
406. Schaudt, O. On Weighted Efficient Total Domination. *Journal of Discrete Algorithms* **2012**, *10*, 61–69, doi:10.1016/j.jda.2011.06.001.
407. Tratch, S.S.; Zefirov, N.S. From Substituted Derivatives to Substitution Profiles, Some New Possibilities of the Polya's Enumeration Techniques. *Adv Chem Model* **2015**, *5*, 179.
408. Yousaf, A.; Nadeem, M. An Efficient Technique to Construct Certain Counting Polynomials and Related Topological Indices for 2D-Planar Graphs. *Polycycl. Aromat. Compd.* **2022**, *42*, 1–15, doi:10.1080/10406638.2021.1892780.
409. de Freitas, R.; Dias, B.; Maculan, N.; Szwarcfiter, J. On Distance Graph Coloring Problems. *Intl. Trans. in Op. Res.* **2021**, *28*, 1213–1241, doi:10.1111/itor.12626.
410. Slamın, S.; Adiwijaya, N.O.; Hasan, M.A.; Dafik, D.; Wijaya, K. Local Super Antimagic Total Labeling for Vertex Coloring of Graphs. *Symmetry* **2020**, *12*, 1843, doi:10.3390/sym12111843.
411. Šurimová, M.; Lužar, B.; Madaras, T. A Dynamic Coloring of Graphs. *Discrete Appl. Math.* **2020**, *284*, 224–233, doi:10.1016/j.dam.2020.03.038.
412. Dokeroglu, T.; Sevinc, E. Memetic Teaching–Learning–Based Optimization Algorithms for Large Graph Coloring Problems. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **2021**, *102*, 104282, doi:10.1016/j.engappai.2021.104282.
413. Zaker, M. A New Vertex Coloring Heuristic and Corresponding Chromatic Number. *Algorithmica* **2020**, *82*, 2395–2414, doi:10.1007/s00453-020-00689-4.
414. Lehner, F.; Smith, S.M. On Symmetries of Edge and Vertex Colourings of Graphs. *Discrete Math.* **2020**, *343*, 111959, doi:10.1016/j.disc.2020.111959.
415. Ahmadi, B.; Alinaghipour, F.; Shekarriz, M.H. Number of Distinguishing Colorings and Partitions. *Discrete Math.* **2020**, *343*, 111984, doi:10.1016/j.disc.2020.111984.
416. Buluç, A.; Meyerhenke, H.; Safro, I.; Sanders, P.; Schulz, C. Recent Advances in Graph Partitioning. In *Algorithm Engineering*; Kliemann, L., Sanders, P., Eds.; Lecture Notes in Computer Science; Springer International Publishing: Cham, 2016; Vol. 9220, pp. 117–158 ISBN 978-3-319-49486-9.
417. Choi, D.; Han, J.; Lim, J.; Han, J.; Bok, K.; Yoo, J. Dynamic Graph Partitioning Scheme for Supporting Load Balancing in Distributed Graph Environments. *IEEE Access* **2021**, *9*, 65254–65265, doi:10.1109/ACCESS.2021.3075457.
418. Miyazawa, F.K.; Moura, P.F.S.; Ota, M.J.; Wakabayashi, Y. Partitioning a Graph into Balanced Connected Classes: Formulations, Separation and Experiments. *European Journal of Operational Research* **2021**, *293*, 826–836, doi:10.1016/j.ejor.2020.12.059.

419. Miyazawa, F.K.; Moura, P.F.S.; Ota, M.J.; Wakabayashi, Y. Cut and Flow Formulations for the Balanced Connected K-Partition Problem. In *Combinatorial Optimization*; Baiou, M., Gendron, B., Günlük, O., Mahjoub, A.R., Eds.; Lecture Notes in Computer Science; Springer International Publishing: Cham, 2020; Vol. 12176, pp. 128–139 ISBN 978-3-030-53261-1.
420. Bruglieri, M.; Cordone, R. Metaheuristics for the Minimum Gap Graph Partitioning Problem. *Computers & Operations Research* **2021**, *132*, 105301, doi:10.1016/j.cor.2021.105301.
421. Bok, K.; Kim, J.; Yoo, J. Dynamic Partitioning Supporting Load Balancing for Distributed RDF Graph Stores. *Symmetry* **2019**, *11*, 926, doi:10.3390/sym11070926.
422. Zheng, Z.; Wang, C.; Ding, Y.; Li, L.; Li, D. Research on Partitioning Algorithm Based on RDF Graph. *Concurrency Computat Pract Exper* **2021**, *33*, e5612, doi:10.1002/cpe.5612.
423. Wagner, K. Über eine Eigenschaft der ebenen Komplexe. *Math. Ann.* **1937**, *114*, 570–590, doi:10.1007/BF01594196.
424. Bodlaender, H.L. A Tourist Guide through Treewidth. *Acta Cybern* **1993**, *11*, 1.
425. Ateskan, E.R.; Erciyes, K.; Dalkilic, M.E. Parallelization of Network Motif Discovery Using Star Contraction. *Parallel Computing* **2021**, *101*, 102734, doi:10.1016/j.parco.2020.102734.
426. Pothén, A.; Simon, H.D.; Liou, K.-P. Partitioning Sparse Matrices with Eigenvectors of Graphs. *SIAM J. Matrix Anal. & Appl.* **1990**, *11*, 430–452, doi:10.1137/0611030.
427. Gupta, A. Fast and Effective Algorithms for Graph Partitioning and Sparse-Matrix Ordering. *IBM J. Res. & Dev.* **1997**, *41*, 171–183, doi:10.1147/rd.411.0171.
428. Gilbert, J.R.; Miller, G.L.; Teng, S.-H. Geometric Mesh Partitioning: Implementation and Experiments. *SIAM J. Sci. Comput.* **1998**, *19*, 2091–2110, doi:10.1137/S1064827594275339.
429. Karypis, G.; Kumar, V. A Fast and High Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs. *SIAM J. Sci. Comput.* **1998**, *20*, 359–392, doi:10.1137/S1064827595287997.

Anexa A

Numere de identificare „doi” ale materialelor obținute din baza de date Materials Project (în limita disponibilității).

Ca₂Si 2020, doi:10.17188/1326279.
Ca₂Si 2020, doi:10.17188/1200545.
CoSn 2020, doi:10.17188/1195668.
FeSiW 2020, doi:10.17188/1313379.
FeSn 2020, doi:10.17188/1196531.
FeSn₂ 2020, doi:10.17188/1198948.
Li₂S 2020, doi:10.17188/1188036.
Li₂S 2020, doi:10.17188/1187672.
LiSn 2020, doi:10.17188/1274920.
Mg₂Si 2020, doi:10.17188/1189708.
Mg₂Si 2020, doi:10.17188/1350450.
MnO₂ 2020, doi:10.17188/1194246.
MnSn₂ 2020, doi:10.17188/1195239.
MoS₂ 2020, doi:10.17188/1405608.
MoS₂ 2020, doi:10.17188/1190621.
MoS₂ 2020, doi:10.17188/1356030.
Ni₃S₂ 2020, doi:10.17188/1207143.
Ni₃Sn 2020, doi:10.17188/1182445.
SiB₆ 2020, doi:10.17188/1299378.
SiC 2020, doi:10.17188/1188302.
SiC 2020, doi:10.17188/1286631.
SiC 2020, doi:10.17188/1293198.
SiC 2020, doi:10.17188/1274550.
SiC 2020, doi:10.17188/1282015.
SiC 2020, doi:10.17188/1274601.
SiCN 2020, doi:10.17188/1307895.
SiF₄ 2020, doi:10.17188/1192953.
SiO 2020, doi:10.17188/1206375.
SiO₂ 2017, doi:10.17188/1269940.
SiO₂ 2017, doi:10.17188/1187397.
SiO₂ 2019, doi:10.17188/1270058.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269641.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1185095.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269285.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269316.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1272702.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1285591.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1272870.
TaO₂F 2020, doi:10.17188/1206692.
TaS₂ 2020, doi:10.17188/1184824.
TaS₂ 2020, doi:10.17188/1195033.
TaS₂ 2020, doi:10.17188/1268593.
Ti₂AlC 2020, doi:10.17188/1189314.
Ti₂N 2020, doi:10.17188/1308014.
Ti₂N 2020, doi:10.17188/1305995.
TiB 2020, doi:10.17188/1307753.
TiB 2020, doi:10.17188/1186675.
TiC 2020, doi:10.17188/1279030.
TiF₃ 2020, doi:10.17188/1272347.
TiF₃ 2020, doi:10.17188/1279486.
TiH₂ 2020, doi:10.17188/1199952.
TiH₂ 2020, doi:10.17188/1200210.
TiN 2020, doi:10.17188/1208488.
TiN 2020, doi:10.17188/1317419.
TiNi 2020, doi:10.17188/1279910.
TiNiSn 2020, doi:10.17188/1198972.
TiNiSn 2020, doi:10.17188/1278213.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1200610.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1267616.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1313030.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1206871.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1190651.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1208044.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1276438.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1296886.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1325099.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1289514.
TiO₂ 2020, doi:10.17188/1207597.
TiOF₂ 2020, doi:10.17188/1207366.
TiS₂ 2020, doi:10.17188/1270160.
TiS₃ 2020, doi:10.17188/1270828.
TiS₃ 2020, doi:10.17188/1316982.
TiSb₂ 2020, doi:10.17188/1274170.
TiSi₂ 2020, doi:10.17188/1276040.
V(MoS₂)₂ 2020, doi:10.17188/1268772.
V₂O₃ 2020, doi:10.17188/1287055.

- SiO₂ 2020, doi:10.17188/1267732.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269434.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1307810.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1187475.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1267068.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1267622.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269045.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269540.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269592.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1267252.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1281938.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1272685.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1269638.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1279996.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1272701.
SiO₂ 2020, doi:10.17188/1183680.
SiO₄ 2019, doi:10.17188/1284099.
SiP₂ 2020, doi:10.17188/1196344.
Sm₂O₃ 2020, doi:10.17188/1283995.
Sm₂O₃ 2020, doi:10.17188/1187320.
SmNi₅ 2017, doi:10.17188/1187332.
Sn₃P₄ 2020, doi:10.17188/1283921.
SnCl₂ 2020, doi:10.17188/1274957.
SnO 2020, doi:10.17188/1196204.
SnO 2020, doi:10.17188/1267079.
SnO 2020, doi:10.17188/1317491.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1272838.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1189304.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1189303.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1272375.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1289755.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1267408.
SnO₂ 2020, doi:10.17188/1272823.
SnP 2020, doi:10.17188/1208376.
SnP 2020, doi:10.17188/1288705.
SnS 2020, doi:10.17188/1184823.
SnS 2020, doi:10.17188/1270980.
SnS 2020, doi:10.17188/1189751.
SnS 2020, doi:10.17188/1193456.
SnS 2020, doi:10.17188/1267753.
SnS₂ 2020, doi:10.17188/1317319.
SnS₂ 2020, doi:10.17188/1274574.
SnSb 2020, doi:10.17188/1191838.
SnSb 2020, doi:10.17188/1187247.
SnSe 2020, doi:10.17188/1197111.
SnSe 2020, doi:10.17188/1278938.
SnSe 2020, doi:10.17188/1201262.
SnTe 2020, doi:10.17188/1191837.
V₂O₅ 2020, doi:10.17188/1263006.
V₂O₅ 2020, doi:10.17188/1278274.
V₃Ni 2020, doi:10.17188/1287488.
V₃S₄ 2020, doi:10.17188/1187375.
V₃S₄ 2020, doi:10.17188/1307886.
V₃S₄ 2020, doi:10.17188/1271725.
VCl₃ 2020, doi:10.17188/1202242.
VO₂ 2020, doi:10.17188/1286650.
VO₂ 2020, doi:10.17188/1286652.
VPO₅ 2020, doi:10.17188/1193783.
VS₂ 2020, doi:10.17188/1330007.
VSi₂ 2020, doi:10.17188/1187622.
VSi₂ 2020, doi:10.17188/1187307.
VSO₅ 2020, doi:10.17188/1194160.
WC 2020, doi:10.17188/1325091.
WO₃ 2020, doi:10.17188/1287075.
WO₃ 2020, doi:10.17188/1194456.
WS₂ 2020, doi:10.17188/1316324.
WSe₂ 2020, doi:10.17188/1192989.
Y(HO)₃ 2020, doi:10.17188/1199894.
Y(HO)₃ 2020, doi:10.17188/1278448.
Y₂O₃ 2020, doi:10.17188/1282353.
Zn(HO)₂ 2020, doi:10.17188/1278398.
Zn(InS₂)₂ 2020, doi:10.17188/1197464.
Zn(InS₂)₂ 2020, doi:10.17188/1196855.
Zn₃P₂ 2020, doi:10.17188/1307746.
ZnBr₂ 2020, doi:10.17188/1275388.
ZnCl₂ 2020, doi:10.17188/1199055.
ZnCl₂ 2020, doi:10.17188/1199075.
ZnCl₂ 2020, doi:10.17188/1273784.
ZnF₂ 2020, doi:10.17188/1300170.
ZnI₂ 2020, doi:10.17188/1276027.
ZnNi 2020, doi:10.17188/1274115.
ZnO 2020, doi:10.17188/1195051.
ZnO 2020, doi:10.17188/1349869.
ZnS 2020, doi:10.17188/1186873.
ZnS 2020, doi:10.17188/1317004.
ZnS 2020, doi:10.17188/1187297.
ZnSe 2020, doi:10.17188/1188456.
ZnTe 2020, doi:10.17188/1276134.
ZnTe 2020, doi:10.17188/1197153.
ZnTe 2020, doi:10.17188/1265112.
ZnTe 2020, doi:10.17188/1282253.
ZnWO₄ 2020, doi:10.17188/1193655.
ZrB 2020, doi:10.17188/1208219.
ZrCrFe 2020, doi:10.17188/1279146.
ZrH₂ 2020, doi:10.17188/1200012.
ZrH₂ 2020, doi:10.17188/1199947.

SnTe **2020**, doi:10.17188/1193534. ZrNCl **2020**, doi:10.17188/1281860.
Sr₂RuO₄ **2020**, doi:10.17188/1208277. ZrNCl **2020**, doi:10.17188/1279329.
SrCl₂ **2020**, doi:10.17188/1199327. ZrNi **2020**, doi:10.17188/1269106.
SrIrO₃ **2020**, doi:10.17188/1349473. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1202679.
SrRuO₃ **2020**, doi:10.17188/1198768. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1269446.
SrRuO₃ **2020**, doi:10.17188/1208087. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1289538.
SrSnO₃ **2020**, doi:10.17188/1267262. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1289762.
SrTiO₃ **2020**, doi:10.17188/1263154. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1290180.
Ta₂O₅ **2020**, doi:10.17188/1268205. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1303780.
Ta₂O₅ **2020**, doi:10.17188/1278273. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1200956.
TaNO **2020**, doi:10.17188/1267194. ZrO₂ **2020**, doi:10.17188/1289413.
TaNO **2020**, doi:10.17188/1207911. ZrSi **2020**, doi:10.17188/1187738.