

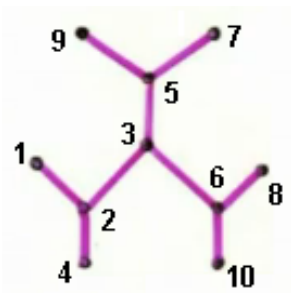


TEST
INTRODUCERE ÎN CHIMIA STRUCTURALĂ NANO-TOPOLOGICĂ

START: 1p.

1.(0.5p) Enunțați *teorema* fundamentală a *grafului neorientat*.

2.(1p) Se dă graful:

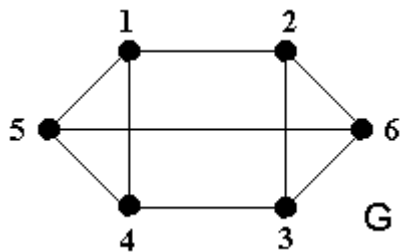


Scrieți succesiunea de vârfuri folosind metoda de parcurgere „în lățime” BF (breadth finding) și „în adâncime” DF (deep finding) pornind de la vârful „9”:

a) 5 (0.5p)

b) 3 (0.5p)

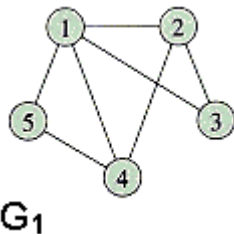
3.(1p) Se dă graful:



a) Construiți matricea de *distanță* (0.5p)

b) Construiți matricea de *adiacență* (0.5p)

4. (2p) Se dă graful:



a) Determinați forma grafului G_2 știind că este *automorf* cu graful G_1 și este definit de permutarea:

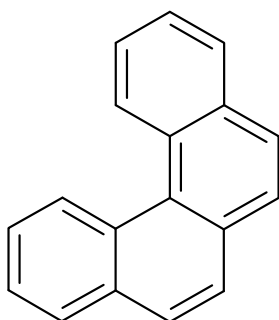
$$P_{G_2} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix} \text{ (1p)}$$

b) Determinați forma grafului H știind că este *izomorf* cu graful G_1 și este definit de permutarea: $P_H = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ (1p)

5. (0.5p) Enunțați *teorema lui Euler*. [pentru Chimie Didactică: *Scrieți definiția poliedrului și enumerați tipurile acestuia*]

6. (0.5p) Scrieți formula lui Euler generalizată pentru *fullerenă*. [pentru Chimie Didactică: *Definiți Fullerena*]

7. (1p) Se dă structura:



- a) Scrieți toate structurile Kekule asociate (0.5p)
b) Scrieți toate structurile Kekule algebrice (0.5p)

8.(1p) Definiți *matricea Hueckel* și formulați *polinomul caracteristic* asociat

9. (1.5p) Explicați *metoda enumerării* căilor topologice într-un graf chimic (0.5). Aplicați metoda la *structura de la punctul 7*(1p).
