

Sustituyentes y simetría molecular

Mario Ramírez Mendoza¹, Jesús Hernández Ventura², Mario Arciga Alejandro³, Vanelly Vásquez Torres⁴

¹Universidad del Istmo, Campus Tehuantepec, Carrera de Lic. en Matemáticas Aplicadas. Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca.

²Universidad del Istmo, Campus Tehuantepec, Carrera de Ing. Química. Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca.

³Universidad del Istmo, Campus Tehuantepec, Carrera de Lic. en Matemáticas Aplicadas. Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca.

⁴Universidad del Istmo, Campus Tehuantepec, Carrera de Lic. en Matemáticas Aplicadas. Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca.

Teléfono (971) 5224050 Ext. 116

E-mail: mexico12ago@hotmail.com.mx

Resumen — Es sabido que la forma en que se distribuyen los átomos en una molécula genera determinadas propiedades moleculares de ésta [1]. El tipo de simetría que guarda esta distribución dará información sobre estas propiedades. La simetría molecular no siempre es sencillo determinar. El análisis de la configuración de las moléculas en el espacio requiere de ver a éstas como un objeto matemático, como un cuerpo geométrico. Esto requiere de la introducción, en el área de la estereoquímica, de conceptos geométricos como son los elementos de simetría y operaciones de simetría. En esta área de la química es conocido que la diferencia de esta orientación tridimensional tiene consecuencia en las propiedades físicas, químicas y biológicas que pudieran tener estas moléculas [2]. En el presente trabajo se pretende expresar una molécula como una sucesión de operaciones de simetría. Además, mostrar que con esta representación los isómeros constitucionales, de inicio, ya son diferentes debido a su expresión matemática.

Palabras Clave – simetría molecular y matrices, isómeros cis-trans, nomenclatura E/Z – rotaciones e inversiones.

Abstract — It is known that the way in which the atoms are distributed in a molecule generates certain molecular properties of it [1]. The type of symmetry that this distribution keeps will give information about these properties. Molecular symmetry is not always easy to determine. The analysis of the configuration of molecules in space requires seeing them as a mathematical object, as a geometric body. This requires the introduction, in the area of stereochemistry, of geometric concepts such as symmetry elements and symmetry operations. In this area of chemistry it is known that the difference in this three-dimensional orientation has a consequence on the physical, chemical and biological properties that these molecules could have [2]. In the present work it is intended to express a molecule as a succession of symmetry operations. In addition, show that with this representation the constitutional isomers, from the beginning, are already different due to their mathematical expression.

Keywords — molecular symmetry and matrices, cis-trans isomers, E/Z nomenclature – rotations and inversions.

I. INTRODUCCIÓN

La aplicación de herramientas matemáticas en el campo de la química cada vez se hace más presente. Existen libros cuyo contenido está parcialmente o totalmente dedicado a la aplicación de conceptos matemáticos al estudio de la estructura molecular [3, 4, 5, 6, 7]. También se encuentran artículos científicos que destacan y explican estas aplicaciones [9, 10, 11, 12, 13]. La simetría que guardan algunas moléculas fue motivo de atención ya de tiempo atrás. Dos isómeros con una misma fórmula estructural pero cuyos átomos están enlazados de forma diferente en el espacio dan lugar a diferentes moléculas. En particular, para los estereoisómeros, esto dio lugar a la introducción de isómeros cis-trans, que debido a problemas de los sustituyentes se ha ido abandonado esta nomenclatura para hacer uso de la notación E/Z que, a nuestro criterio, también tiene deficiencias para ubicar a dos isómeros, su diferencia con la nomenclatura cis-trans es la prioridad del sustituyente. Este pequeño asunto se muestra con un ejemplo concreto.

Aclaremos que cuando se escriba la palabra grupo nos referimos a los grupos funcionales del área de la química. En el caso de que se le asocie otro contenido se mencionará.

En el presente trabajo se da el concepto de componentes equivalentes en una estructura molecular intentando ampliar el concepto de sustituyentes (átomos o grupos). La definición de átomos equivalentes se puede encontrar en [1]. Aquí explicamos el concepto de componentes equivalentes, y decimos que estos son aquellos que 1) son del mismo tipo, 2) en la molécula en estudio un componente puede ser obtenido del otro por medio de una operación de simetría.

Para ilustrar mostramos el siguiente ejemplo donde se considera que la molécula se encuentra en el espacio tridimensional. Ver fig. 1.

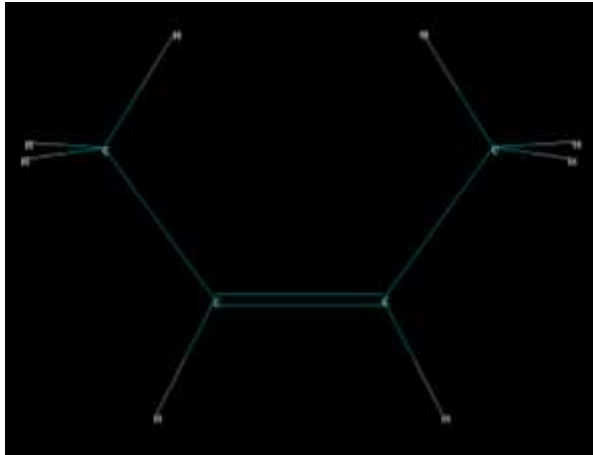


Fig.1. Molécula C₄H₈

En éste ejemplo los componentes son tanto grupos como átomos. Para un plano perpendicular al enlace doble los componentes son del mismo tipo y simétricos bajo una reflexión con respecto al plano mencionado, el componente 2 se obtiene del 1 o al contrario. Pero para un plano que pasa a lo largo del enlace doble estos componentes no son simétricos bajo la misma operación porque no son del mismo tipo.

Puede suceder que la molécula contenga componentes de la misma especie pero que no haya simetría entre ellos, entonces tampoco se consideran componentes equivalentes.

Los símbolos para las diferentes operaciones de simetría las tomaremos de la literatura citada, en particular de [1] y las escribiremos más adelante. Por el momento anotamos sus nombres. Nos referimos a las operaciones de rotación, reflexión e inversión. Los elementos de simetría son un punto, un eje o un plano.

Se puede notar en las referencias bibliográficas que para una molécula en particular es posible hallar todas sus posibles operaciones de simetría pero no se establece una cadena de transformaciones que indiquen la manera en que se obtiene la molécula en estudio. En nuestro escrito introducimos los símbolos matemáticos $\sum_{k=1}^n ()$ y $\prod_{j=1}^m ()$ para denotar esa sucesión de transformaciones. Las transformaciones aplicadas son las operaciones de simetría.

II. METODOLOGÍA

En el presente trabajo llamamos molécula a un conjunto finito de puntos conectados y distribuidos en el espacio tridimensional. Este conjunto de puntos a su vez se dividirá en subconjuntos cuyos componentes de cada uno tendrán características propias, y su diferencia consistirá en su posición en el espacio respecto a un sistema de referencia. Considerando la simetría de los componentes cada subconjunto aún puede dividirse. Así, por ejemplo, la molécula H₂O está formado por dos conjuntos A₁, A₂ cuyos componentes se señalan a continuación

$$A_1 = \{2 \text{ Hidrógenos}\} = \{h^1, h^2\}; A_2 = \{1 \text{ Oxígeno}\} = \{o^1\}$$

En la notación anterior se enumeran los puntos del mismo tipo, el subíndice superior lo representa. En el caso de que haya muchos puntos del mismo tipo se usa la notación:

$$\{x^j, j = \overline{1, n}\}$$

lo cual indica que hay n puntos del mismo tipo.

La molécula CH₄ está formado por dos conjuntos A₁, A₂, los cuales son

$$A_1 = \{1 \text{ Carbono}\} = \{c^1\}; A_2 = \{4 \text{ Hidrógenos}\} = \{h^j, j = \overline{1, 4}\}$$

Las transformaciones son matrices con las cuales se realizan las operaciones de simetría. La expresión matemática de las matrices se puede hallar en la literatura [8]. La notación para estas operaciones son las usadas en [1] y son las siguientes:

TABLA 1.
ELEMENTOS DE SIMETRÍA, OPERACIONES DE SIMETRÍA Y SUS SIMBOLOS.

Elemento de simetría	Operación de simetría	Símbolo
Punto	Inversión	i
Plano	Reflexión	σ, E
Eje	Rotación	C
Eje impropio	Rotación más Reflexión	S

Hablemos un poco sobre su contenido. La transformación identidad se denota con la letra E . Explicamos las operaciones C, σ, i, S .

El símbolo general de la rotación es C_n donde el subíndice significa que se rota el componente un ángulo $\frac{2\pi}{n}$ en dirección antihorario. Así, la expresión C_2 significa que se rota el componente un ángulo $\frac{2\pi}{2} = \pi$.

La operación de reflexión la denotamos con el símbolo σ , con un subíndice inferior señalamos el plano correspondiente de la operación. Por ejemplo, una reflexión respecto al plano ZY lo representaremos de la siguiente manera:

$$\sigma_{ZY}$$

La operación de inversión i es una operación de simetría respecto a un punto, y esta puede ser sustituida por la operación S_2 que se explica a continuación.

El símbolo general para el eje impropio es S_n y consiste en una rotación un ángulo $\frac{2\pi}{n}$ seguido de una operación de reflexión a un plano perpendicular al eje de rotación. Si consideramos que se aplica una rotación respecto al eje Z, entonces S_2 significa una operación de rotación respecto al eje Z un ángulo π seguido de una operación de reflexión respecto al plano XY. Para más información se puede consultar [1].

En nuestro estudio el eje de rotación será siempre el eje Z si no se menciona otra indicación.

Los componentes de la molécula los representaremos con las letras: a, b, c, \dots dependiendo de la letra con que se simboliza el componente. Por ejemplo, el Hidrógeno con la letra h , el Oxígeno: o , etc

La forma general de las matrices es

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

que al aplicarla a algún componente $a^1 = (a_1^1, a_2^1, a_3^1)$ de la molécula, la operación tendrá la forma

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^1 \\ a_2^1 \\ a_3^1 \end{pmatrix}$$

transformando el componente $a^1 = (a_1^1, a_2^1, a_3^1)$ en uno simétrico a él: $a^2 = (a_1^2, a_2^2, a_3^2)$, es decir,

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^1 \\ a_2^1 \\ a_3^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^2 \\ a_2^2 \\ a_3^2 \end{pmatrix}$$

Como se escribió en la expresión anterior, los componentes de la molécula se representaran como $a^j = (a_1^j, a_2^j, a_3^j)$, es decir, como un punto en el espacio con coordenadas (a_1, a_2, a_3) .

En general, una operación de simetría aplicada sobre un componente a^1 que genera el componente a^2 se representa como:

$$T\{a^1\} = a^2$$

donde T es alguna de las operaciones de la Tabla 1.

Como las operaciones se aplican más de una vez, explicamos brevemente lo que significan los símbolos que a continuación se presentan. Los subíndices tomaran ciertos valores concretos. Para una aplicación sucesiva de operaciones de simetría sobre componentes de un mismo tipo anotamos:

$$\prod_{j=1}^3 T_j\{a^1\} \quad (1)$$

En esta representación estamos suponiendo que se aplican tres operaciones de simetría T_j al elemento inicial a^1 dando como resultado los componentes a^2 , a^3 y a^4 . De forma extensa se escribe:

$$\prod_{j=1}^3 T_j\{a^1\} = T_3\{T_2\{T_1\{a^1\}\}\} = T_3\{T_2\{a^2\}\} = T_3\{a^3\} = a^4$$

Para el total de subconjuntos que conforman la molécula se aplica la segunda expresión:

$$\sum_{m=1}^5 \{*\} \quad (2)$$

En la representación (2) se está suponiendo que existen 5 subconjuntos de componentes, cada subconjunto con características propias.

Más adelante daremos ejemplos concretos de diferentes moléculas donde aplicamos esta notación para describirlas y obtener su representación en el espacio, lo cual es el objetivo del presente escrito.

Señalamos que para una molécula con una cantidad suficientemente grande de componentes simétricos, las notaciones (1) y (2) son factibles.

Llamamos simetría trivial a aquella donde todos los componentes de la molécula se obtienen aplicando la operación identidad. Este tipo de simetría, a nuestra opinión, no arroja información sobre las propiedades de la molécula. No obstante, la operación identidad es necesaria para algunos componentes de determinada molécula.

III. RESULTADOS

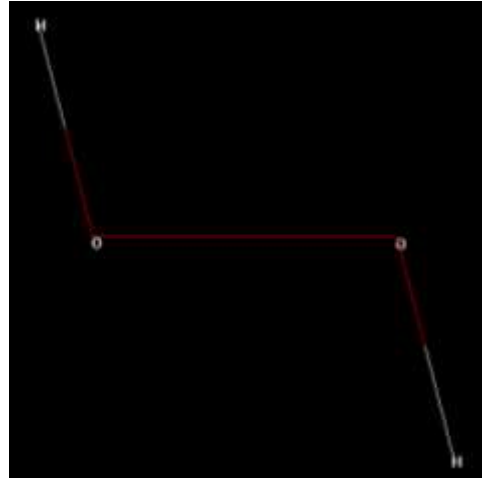


Fig. 2. Molécula H_2O_2

Iniciemos analizando una molécula sencilla, la molécula del agua oxigenada H_2O_2 . Ver fig. 2. El hidrógeno lo representaremos con la letra h y el oxígeno con la letra o . Considerando que podemos manejar los ejes del sistema coordenado, tomemos el plano XY en dirección del enlace $O - O$, y como punto de referencia el origen con coordenadas $(0,0,0)$ a la mitad del enlace. Coloquemos un átomo de oxígeno en el punto $o^1 = (o_1^1, o_2^1, o_3^1) = (o_1^1, 0, 0)$ y un átomo de hidrógeno $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (h_1^1, 0, h_3^1)$.

Aplicando el siguiente conjunto de operaciones se forma la estructura molecular en estudio.

$$T_1\{o^1\} + T_3\{T_2\{h^1\}\} \quad (3)$$

La operación T_1 es una reflexión a través del plano YZ con la cual obtenemos el elemento o^2 a partir del elemento o^1 . T_2, T_3 son también operaciones de reflexión. T_2 se aplica respecto al plano YZ , mientras que la operación T_3 se aplica respecto al plano XY . En otras palabras: $T_1 = T_2 = \sigma_{YZ}$; $T_3 = \sigma_{XY}$.

Como la obtención del elemento h^2 es resultado de la aplicación sucesiva de las transformaciones T_2 y T_3 , escribiremos esta composición de operaciones como una sola que representamos como T :

$$T_3\{T_2\{h^1\}\} = (T_3 \circ T_2)\{h^1\} = T\{h^1\}$$

Por tanto, (3) será representada como

$$T_1\{o^1\} + T\{h^1\}$$

Desglosamos éste ejemplo. Presentamos las matrices y los respectivos elementos de simetría. Los números que aparecen en el desglose representando la posición de los componentes no son los que en realidad deben ser. Solamente hacemos uso de ellos debido a la funcionalidad del paquete computacional que ocupamos, pero estos pueden ser cambiados en cualquier momento.

Obtenemos el componente simétrico de o^1 .

Las matrices de reflexión respecto a los planos XY y YZ son

$$\sigma_{XY} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{YZ} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

respectivamente. La matriz identidad tiene la forma:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Aplicamos σ_{YZ} al componente $o^1 = (o_1^1, 0, 0) = (1, 0, 0)$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

y obtenemos su simétrico $o^2 = (-o_1^1, 0, 0) = (-1, 0, 0)$.

Para hallar el componente simétrico de h^1 procederemos de dos maneras, señalando que la primera de ellas no la consideraremos pues obtenemos componentes de paso que no forman parte de la estructura pero solamente por detalle la explicamos. La primera manera es aplicando sucesivamente dos operaciones de reflexión. En la segunda manera multiplicamos dichas matrices para aplicar una sola operación, obteniendo el mismo resultado.

Y bien, aplicamos σ_{YZ} al componente $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (1.5, 0, -1)$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Este es el momento en que obtenemos un componente de paso que no forma parte de la estructura molecular. A éste componente de paso ahora aplicamos la operación σ_{XY} :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

obteniendo el resultado requerido.

Explicamos la segunda forma. Multiplicamos las dos matrices $\sigma_{XY} \circ \sigma_{YZ}$ y obtenemos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Aplicamos esta nueva matriz al punto inicial $h^1 = (h_1^1, h_2^1, h_3^1) = (1.5, 0, -1)$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y, como se nota, se obtuvo el mismo resultado.

A. Isómeros constitucionales

Analicemos un par de moléculas con la misma fórmula molecular. Nos referimos a la molécula: C_3H_4 . Ver figs. 3 y 4. Mostramos dos diferentes posiciones de una misma molécula con el propósito de que sea visible su simetría, la simetría escondida que se mencionó anteriormente. Además, notar que el conjunto de operaciones puede ser diferente dependiendo de los elementos de simetría que se elijan. Las figs. 3, A) y B) representan la misma molécula, así como las figs. 4, C) y D). Elegimos el conjunto de operaciones con la mayor cantidad de componentes simétricos, partiendo de que la simetría trivial es la que menos interesa.

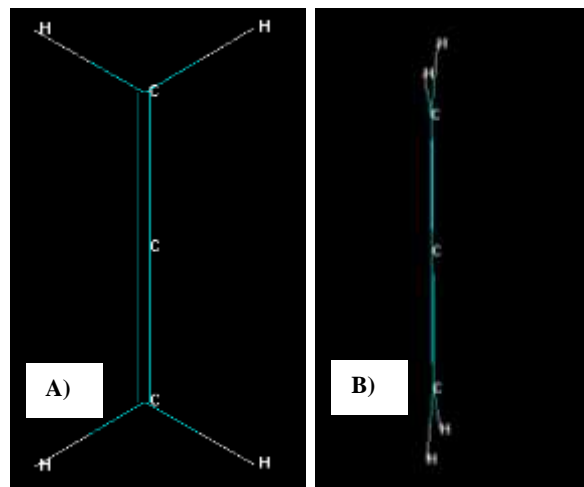


Fig. 3. Molécula C_3H_4

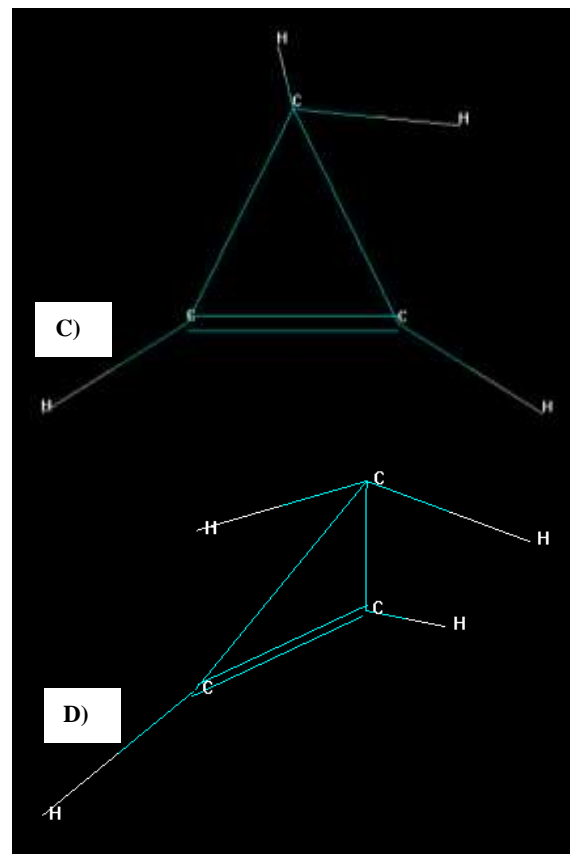


Fig. 4. Molécula C_3H_4

Consideremos primero un plano perpendicular al punto medio del enlace doble, fig. 5, y posteriormente añadimos un plano en dirección del enlace, fig.6. Obtendremos dos sucesiones diferentes de simetría que nos proporcionan la misma molécula. A pesar de que la molécula se considera plana, la aplicación de las operaciones las realizamos en el espacio tridimensional. Explicamos el primer caso, un plano perpendicular al enlace doble que pasa por el carbono de en medio. Ver fig. 5.

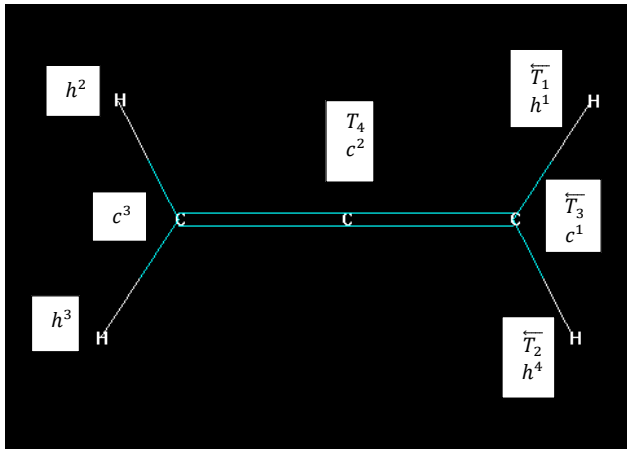


Fig. 5. Aplicación de transformaciones a la molécula C_3H_4

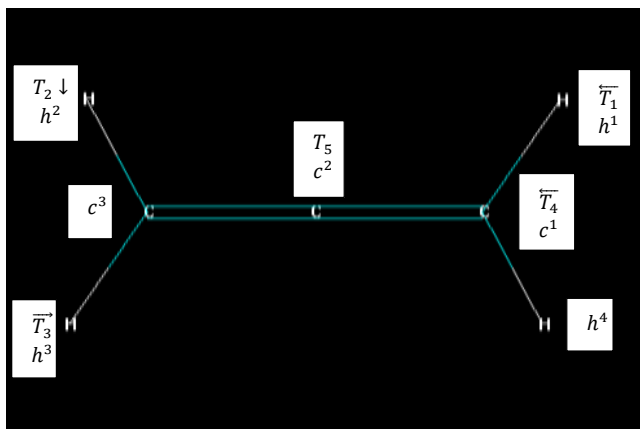


Fig. 6. Otro grupo de simetría aplicado a la molécula C_3H_4

Así, la sucesión de operaciones para el primer caso es:

$$T_1\{h^1\} + T_2\{h^4\} + T_3\{c^1\} + T_4\{c^2\} \quad (4)$$

donde, $T_1 = T_2 = T_3 = \sigma_{YZ}$; $T_4 = E_{YZ}$; y cada operación en (4) da como resultado los componentes

$$h^2, h^3, c^3, c^2$$

respectivamente. Las correspondientes matrices ya fueron escritas con anterioridad. Las flechas en la parte de superior de la transformación aplicada indica la dirección grafica de la simetría.

Para el segundo caso se consideran dos planos, uno perpendicular al enlace y otro en dirección del enlace. Presentamos la manera en que se aplican las operaciones de simetría. Ver fig.6.

$$\left(T_3(T_2(T_1\{h^1\}))\right) + T_4\{c^1\} + T_5\{c^2\} \quad (5)$$

donde, $T_1 = T_3 = T_4 = \sigma_{YZ}$; $T_2 = \sigma_{XY}$; $T_5 = E_{YZ}$. Las operaciones en el primer termino de (5) se realizan de adentro hacia afuera, es decir, primero se aplica la operación $T_1\{h^1\}$, etc.

Con las moléculas de las figs. 4 C) y D) se procedería de forma semejante.

A. Isómeros Cis-Trans

Analicemos la simetría de los siguientes isómeros. Ver fig. 7.

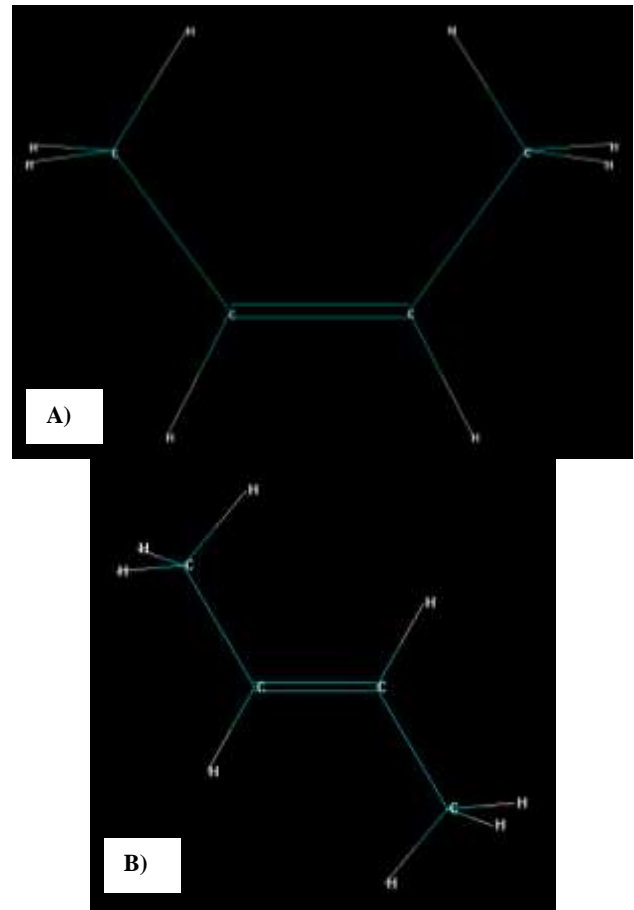


Figura 7. Dos isómeros de la molécula C_4H_8

En éste ejemplo los componentes son tanto grupos como átomos. Tomemos como referencia el plano perpendicular al enlace, el plano YZ . Ya familiarizados con las operaciones de simetría, escribimos para la fig. 7 A):

$$T_1\{(CH_3)^1\} + T_2\{h^1\} + T_3\{c^1\}$$

donde $T_1 = T_2 = T_3 \equiv \sigma_{YZ}$. El primer término da como resultado su componente simétrico $(CH_3)^2$; el segundo término genera el componente h^2 , y finalmente el tercer término da el componente simétrico c^2 .

Para el segundo compuesto de la figura 7 B), tenemos:

$$T_1\{h^1\} + T_2\{(CH_3)^1\} + T_3\{c^1\}$$

donde $T_1 = T_2 = S_2$; $T_3 \equiv \sigma_{XY}$.

De esta manera la nomenclatura cis-trans para diferenciar las moléculas no es necesaria, pues la representación a través de las matrices ya muestra tal diferencia.

Finalmente, analicemos la siguiente molécula, donde no hay isomería cis ni trans. Ver fig. 8.

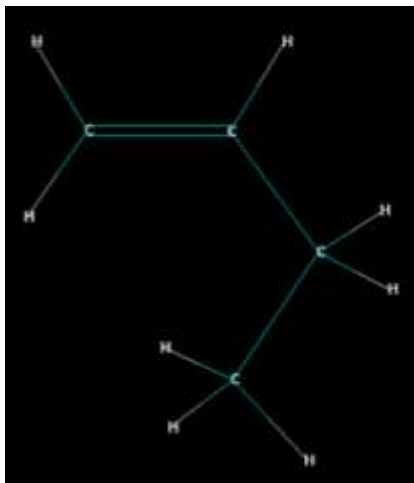


Figura 8. Molécula sin simetría cis, ni trans.

Para éste compuesto el conjunto de operaciones de simetría es:

$$T_2(T_1\{h^1\}) + T_3\{c^1\} + T_4\{(CH_2CH_3)^1\}$$

donde, $T_1 = T_3 \equiv \sigma_{YZ}$; $T_2 \equiv \sigma_{XY}$; $T_4 = S_2^2$

La primera operación en el primer término da como resultado el componente h^2 . La segunda operación en éste mismo término, expresa que se aplica la operación T_2 a h^2 y obtenemos como resultado el componente h^3 . El segundo término da como resultado c^2 , y finalmente, en el tercer término el inicio es el componente CH_2CH_3 y, vía la operación de simetría S_2^2 , regresamos al mismo componente. La última expresión, S_2^2 , indica que se aplica dos veces la operación S_2 .

IV. CONCLUSIONES

Como se señaló en el desarrollo del presente escrito, una molécula puede tener más de un conjunto de simetrías. Dependiendo del conjunto elegido, el número de operaciones varía considerando los componentes simétricos. Es de interés aquella representación que proporcione más información sobre sus propiedades. Por otro parte, para resaltar la utilidad de la expresión matemática para las estructuras moleculares, escribiremos la expresión (4) de forma más compacta. Recordemos que esta expresión tiene la forma

$$T_1\{h^1\} + T_2\{h^4\} + T_3\{c^1\} + T_4\{c^2\}$$

Usando la notación sigma, escribimos:

$$\sum_{k=1}^4 T_k\{a^k\}$$

donde $a^1 = h^1$; $a^2 = h^4$; $a^3 = c^1$; $a^4 = c^2$

Como también se mencionó, no todas las moléculas tienen componentes simétricos; pero en la mayoría de las veces esta simetría está escondida, es una simetría escondida al ojo humano pero que con herramientas matemáticas es posible hallarla, como es el caso del último ejemplo analizado.

Finalmente, en un próximo escrito expondremos un algoritmo basado en los resultados del presente trabajo para, bajo la aplicación de algún lenguaje computacional, construir las moléculas en estudio.

REFERENCIAS

- [1] Cotton F. B. Chemical Applications of Group Theory. 1990. USA.
- [2] Leroy Wade. Química Orgánica. 2004. España.
- [3] Zorkii P.M., Afonina N.N. Simetría Molecular y de Cristales. 1979. URSS.
- [4] Porai-Koshitsa M.A. Simetría Molecular y Estructuras Cristalinas. 1986. URSS
- [5] David J. Willock. Milecylau Simmetry. 2009. United Kingdom.
- [6] Donald A. McQuarrie., John D. Simon. Physical Chemistry: a molecular approach. 1997. USA.
- [7] Trinajstic, N. Chemical Graph Theory. 1992. CRC Press. USA.
- [8] Modenov P. S. Geometria Analitica. 1969. Ed. Ciencia. URSS.
- [9] M. Ramirez, I. Ochoa. The Use of Transformations for a Better Correlation and Prognosis of Physicochemical Properties of Benzene Derivates. Ingeniería y Tecnología Facultad de Ingeniería BUAP. Año 9. No. 19. Octubre 2013-Marzo 2014. Puebla, México.
- [10] Bulanova, A. V; Kharitonova, A. G; Row, K. H. Connection of Topological Characteristics with Physicochemical Parameters of Benzoic Acid Derivaties. Revista de la Universidad de Samara, Rusia. No. 2(36). 2005. Rusia.
- [11] Mario Ramírez Mendoza, Iafas Ochoa Landín, Ma. Guadalupe Hernández Linares. Aplicación de herramientas matemáticas para el análisis de compuestos químicos. Ingeniería y Tecnología Facultad de Ingeniería BUAP. V. 1, No. 21. .2015. Puebla, México.
- [12] A. Nandy, M. Harle, S. Basak. Mathematical Descriptors of DNA sequences: development and applications. General Papers. Arkivie. 2006.
- [13] M. Randich, J. Zupan, A. Balaban, D. Vikić-Topić, D. Plavšić. Graphical Representation of Proteins. Chem. Rev. 2011.