

УДК 512.54

Doi: 10.31772/2712-8970-2025-26-3-334-342

Для цитирования: Сенашов В. И. Приложения теории графов и теории групп в химии, физике // Сибирский аэрокосмический журнал. 2025. Т. 26, № 3. С. 334–342. Doi: 10.31772/2712-8970-2025-26-3-334-342.

For citation: Senashov V. I. [Applications of graph theory and group theory in chemistry, physics]. *Siberian Aerospace Journal*. 2025, Vol. 26, No. 3, P. 334–342. Doi: 10.31772/2712-8970-2025-26-3-334-342.

Приложения теории графов и теории групп в химии, физике

В. И. Сенашов

Институт вычислительного моделирования СО РАН
Российская Федерация, 660036, Красноярск, Академгородок, 50/44
E-mail: sen1112home@mail.ru

Аннотация. Работа посвящена рассмотрению приложений математики, в частности, теории графов и теории групп в химии и физике. Химия была одной из первых, кто воспринял идеи теории графов. Математическая химия является разделом теоретической химии, в котором изучается применение математики к химическим задачам. Возможность формализации молекул на языке структурной химии с помощью графов позволяет методами теории графов определять число различных изомеров. Основным инструментом в математической химии является математическое моделирование с использованием вычислительной техники. Методы теории графов активно применяются в трех областях химии: структурная химия, химическая кинетика, химическая физика полимеров. Теория групп нашла применение во многих областях физики. Теория групп служит для объяснения важнейших характеристик атомных спектров. Теория групп дает возможность единообразного подхода к большому числу задач физики твердого тела. В этих исследованиях активно используются матричные группы и представления унитарных групп. Неприводимые представления групп используются для классификации колебательных и электронных состояний кристалла. Методы теории групп применяются к моделям задач классификации электронных состояний кристалла. В кристаллографии много внимания уделяется приложениям методов теории групп к изучению колебаний атомов, входящих в состав молекулы, относительно их положений равновесия. Результаты могут быть полезны при кодировании информации в сеансах космической связи.

Ключевые слова: математическая химия, атомная физика, кристаллография, теория графов, теория групп, приложения.

Applications of graph theory and group theory in chemistry, physics

V. I. Senashov

Institute of Computational Modelling of Siberian Branch of RAS
50/44, Akademgorodok, Krasnoyarsk, 660036, Russian Federation
E-mail: sen1112home@mail.ru

Abstract. The work is devoted to the consideration of applications of mathematics, in particular, graph theory and group theory in chemistry and physics. Chemistry was one of the first to adopt the ideas of graph theory. Mathematical chemistry is a section of theoretical chemistry that studies the application of mathematics to chemical problems. The possibility of formalizing molecules in the language of structural chemistry using graphs allows one to determine the number of different isomers using graph theory methods. The main tool in mathematical chemistry is mathematical modeling using computer technology. The methods of graph theory are actively used in three areas of chemistry: structural chemistry, chemical kinet-

ics, and chemical physics of polymers. Group theory has found application in many areas of physics. Group theory serves to explain the most important characteristics of atomic spectra. Group theory provides an opportunity for a uniform approach to a large number of problems in solid state physics. Matrix groups and unitary group representations are actively used in these studies. Irreducible group representations are used to classify vibrational and electronic states of a crystal. Methods of group theory are applied to models of problems of classifying electronic states of a crystal. In crystallography, much attention is paid to applications of group theory methods to the study of vibrations of atoms that make up a molecule relative to their equilibrium positions. The results can be useful in encoding information in space communications sessions.

Keywords: Mathematical chemistry, atomic physics, crystallography, graph theory, group theory, applications.

Введение

Работа посвящена рассмотрению приложений математики в физике и химии. Методы теории графов появились в XVIII веке благодаря Л. Эйлеру. Теория групп возникла в XVII в. из рукописи Э. Галуа, затем превратилась в стройную теорию в трудах Л. Эйлера, К. Гаусса, Ж. Лагранжа, Н. Абеля.

Теория графов и теория групп начали активно применяться в химии и физике во второй половине XX в.

В данном обзоре мы приведем приложения теории графов и теории групп в таких разделах математической химии, как структурная химия, органическая химия, химическая кинетика, химическая физика полимеров. Приложениям теории графов в химии посвящена обзорная книга под редакцией Р. Кинга [1].

Без теории графов никак не обойтись при исследовании металлоорганических каркасов, относящихся к координационным полимерам – соединениям, состоящим из повторяющихся звеньев, повторяющихся в одном, двух или трёх измерениях.

Полином Тутте предоставляет важную информацию о структуре графа. Полиномы Тутте способствуют лучшему пониманию свойств химических структур и имеют потенциальные приложения в химии и материаловедении.

Теория графов стала существенным подходом для изучения сложного поведения взаимодействий в белковых системах.

В математической физике будут приведены приложения теории графов и теории групп в физике частиц, кристаллографии, кристаллофизике, в изучении колебаний атомов, теории атомных спектров. Будут рассмотрены приложения к задачам квантовой механики таким, как теория атома, теория твердого тела, к классификации колебательных и электронных состояний кристалла.

Теория представлений групп используется для классификации состояний многоэлектронного атома. Приложением теории групп к квантовой механике является установление правил отбора в различных аспектах квантовой механики. Находят применение в квантовой физике точечные группы вращений и отражений, оставляющих некоторую точку инвариантной.

Теория групп находит применение в молекулярной, атомной физике и физике элементарных частиц.

Теория групп изучает свойства симметрии и вытекающие из них законы сохранения, которые позволяют получать утверждения, используемые в физике твердого тела. В начале двадцатого века это бурно развивающееся направление даже было названо «групповой чумой», угрожающей теории твердого тела.

Соображения групповой симметрии в квантовой механике помогают классифицировать и описывать трансформационные свойства волновых функций.

Применение теории графов и теории групп в химии

Как говорят химики, химия была одной из первых, кто воспринял идеи теории графов. Молекула химического вещества стала представляться графом, вершинами которого были атомы, а связями между атомами — ребра. Возможность формализации молекул на языке структурной химии с помощью графов позволяет методами теории графов определять число различных изомеров. Это позволило математику А. Кэли в 1874 г. решить классическую задачу структурной химии о перечислении изомеров углеводородов [2].

Математическая химия является разделом теоретической химии, в котором изучается применение математики к химическим задачам.

Основой математической химии является это математическое моделирование возможных химических процессов. В математической химии также исследуется зависимость этих процессов от свойств атомов и структуры молекул.

В математической химии возможно построение моделей без привлечения квантовой механики. Критерием истины в математической химии являются математическое доказательство, вычислительный эксперимент и сравнение результатов с экспериментальными данными [2]. Основным инструментом в математической химии является математическое моделирование с использованием вычислительной техники.

Теория графов применяется при исследовании металлоорганических каркасов [3] которые интересны из-за их сложных структур и из-за их прикладного значения в повышении производительности различных технологий. Они находят применение в технологиях хранения энергии, катализа. В работе [3] вычислены спектральные графовые энергии и энтропии металлоорганических каркасов, используя методы теории графов.

Металлоорганические каркасы представляют собой класс пористых полимеров, состоящих из металлических кластеров. Координационные сети, в том числе и металлоорганические каркасы, также относятся к координационным полимерам, то есть координационным соединениям, состоящим из периодически повторяющихся координационных звеньев и протяжённые в одном, двух или трёх измерениях [4].

В 1995 г. О. Яги продемонстрировал кристаллизацию металлоорганических структур [5]. Это стало прорывом, который проложил путь к созданию стабильных и кристаллических пористых материалов, что позволило создать точную конструкцию и повысить механическую стабильность, что дало возможность металлоорганическим структурам сохранять свою пористость в промышленных условиях.

Теория групп широко применяется в органической химии, теория графов используется для предсказания свойств сложных органических молекул [6]. Методы теории графов активно применяются в трех областях химии: структурная химия, химическая кинетика, химическая физика полимеров.

В последнее время теория групп нашла еще одно применение в области химических реакций, в основе которого лежит принцип сохранения орбитальной симметрии, предложенный Р. Вудвордом и Р. Хоффманом (последнему была присуждена Нобелевская премия по химии) [7].

В химической кинетике специалисты изображали кинетическую схему реакций с помощью стрелок, соединяющих вещества, и записывали механизм реакции за реакцией, рисуя тем самым граф сложной химической реакции.

Появились новые типы графов: для молекулярных превращений в качестве вершин рассматривались вещества, в качестве ребер — элементарные реакции; для некоторых графов в качестве вершин служили вещества и реакции.

Симметрия — очень распространенное явление в химии: практически все известные молекулы либо сами обладают симметрией какого-либо рода, либо содержат некоторые симметричные фрагменты [8]. Теория групп является эффективным инструментом для изучения симметричных систем.

Полином Тутте — это классический инвариант полиномиального графа, который предоставляет важную информацию о структуре графа. Полиномы Тутте применяются для силикатных

молекулярных сетей и бензоидных систем. Х. Чен вывел формулы для полициклических химических графов и определил явные аналитические выражения для числа деревьев, связанных подграфов, и ориентаций этих химических полициклических графов. Полиномы Тутте способствуют лучшему пониманию топологических свойств химических структур и имеют потенциальные приложения в химии и материаловедении [9].

Разрезом графа называется множество рёбер, образующих подграф, удаление которых делит граф на две или более компоненты. Метод разреза оказался чрезвычайно полезным в химической теории графов. В статье [10] метод разреза расширен на гиперграфы и применен к кубическим гиперграфам и гипердеревьям. Авторами статьи также разработаны расширения метода на гиперграфы, возникающие в химии [10].

Используемые в теоретической физике диаграммы Фейнмана оказались эффективными в химической кинетике и в химической физике полимеров.

При описании углеводородов молекулярные графы позволяют оценить число возможных изомеров. С помощью теории графов показано, что соединения атомов водорода и углерода с формулой C_nH_{2n+2} допускают всего два неизоморфных варианта при $n = 4$, которым соответствуют две различные углеводородные молекулы: бутан и изобутан. При $n = 5$ существует три изомера и при увеличении n число изомеров резко возрастает. Например, при $n = 20$, возможно существование 366319 изомеров [2]. То есть при исследовании молекулярных графов все большую роль играет вычислительная техника.

Будучи основным инструментом, теория графов, как математический формализм в математической химии, стала существенным подходом для изучения сложного поведения взаимодействий в белковых системах, включая методы, разработанные для доступа к функциям белков и их применения в биологии заболеваний. Определение структур происходит на основе графов, а также методологии, разработанных на уровнях узлов, подграфов и путей. С помощью графов решаются проблемы в многослойной сети, которая более реалистична в биологическом мире [11].

Применение теории графов и теории групп в физике. Кроме химии у теории графов появились новые приложения: теоретическая физика, кристаллография.

Физики в двадцатом веке стали активно применять математические методы, в частности, методы теории групп.

Теория групп нашла применение во многих областях физики. В современной физике частиц активно используются унитарные группы. Группы $SU(3)$ являются группами спиновых и изотопических преобразований, а также являются базовыми подгруппами групп преобразований слабых взаимодействий. В частности, в этих исследованиях активно используются матричные группы и представления унитарных групп. Унитарная группа $SU(3)$ является основой унитарной модели симметрии [12].

Приложения теории групп интенсивно используются в кристаллографии [12–17]. В монографии Л. В. Картоновой [14] рассматривается применение методов теории групп к изучению колебаний атомов, входящих в состав молекулы, относительно их положений равновесия. А. В. Гадолин на основе методов теории графов дал наглядное описание тридцати двух кристаллографических групп [14].

Структура обычного периодического кристалла может быть описана его элементарной ячейкой, в которой задается определенное распределение атомов, и которая затем размножается на все пространство с помощью подгруппы трехмерных трансляций. Современная кристаллофизика изучает квазикристаллы, структура которых может быть описана аналогично, но вместо одной элементарной ячейки используют группу ячеек, а для заполнения ячейками всего пространства используют итерационные алгоритмы [18].

Теория групп служит для объяснения важнейших характеристик атомных спектров [15]. При рассмотрении конкретных задач теория групп позволяет делать выводы о поведении системы без использования сложных вычислений, только на основе представления о симметрии систе-

мы. Такие предсказания существенны при изучении спектров. Что касается получаемых уровней, то известны их свойства симметрии. Поэтому каждому уровню соответствуют три представления: одно представление симметрической группы, одно — группа вращений и одно — группа отражений.

Взаимосвязь математики и физики иллюстрирует научная деятельность И. Кеплера. Так, в области астрономии он установил и математически описал основные законы небесной механики.

Теория групп находит приложения к задачам квантовой механики таким, как теория атома, теория твердого тела, квантовая химия [19].

Основные принципы применения теории групп в квантовой механике были сформулированы в тридцатые годы двадцатого века. Однако после некоторого периода недоверия к теории групп как средства исследования физических систем, только в середине прошлого века началось активное применение теории групп [15]. Как писал Е. Вигнер, точное решение квантово-механических уравнений настолько трудно, что с помощью прямых вычислений можно получить лишь весьма грубые приближения к точным решениям. Поэтому часто оказывается полезным вывести значительную часть квантово-механических результатов из рассмотрения основных свойств симметрии таких уравнений [15].

Наиболее важными для квантовой механики являются группы координатных преобразований (группы симметрии) и группы перестановок. Группы перестановок применяются для систем с конечным числом элементов. Группы симметрии нелинейных молекул дискретны и конечны, а группы симметрии атомов и линейных молекул непрерывны и бесконечны. Группы, описывающие трансляционную симметрию атомов в кристаллах дискретны и бесконечны [7].

Неприводимые представления групп используются для классификации колебательных и электронных состояний кристалла.

В этих представлениях кристалл рассматривается в качестве системы материальных частиц, которые совершают малые колебания относительно своих положений равновесия. Если предполагать, что положения равновесия частиц образуют конфигурацию, обладающую симметрией группы G , то декартовы составляющие смещений частиц преобразуются по некоторому приводимому представлению этой группы.

При изучении нормальных колебаний кристалла кроме соображений симметрии можно опираться на свойства спектра его собственных частот.

При классификации электронных состояний кристалла дополнительно предполагается, что ядра атомов фиксированы в узлах решетки.

Методы теории групп применяются к упрощенным моделям рассматриваемых задач классификации.

Основным методом приближенного рассмотрения является метод самосогласованного поля. В этом методе задача о взаимодействующих электронах сводится к одноэлектронной, взаимодействие с электроном приближенно заменяется взаимодействием с некоторым полем, обладающим симметрией кристалла. Вопрос о том, насколько хороши решения, полученные при помощи теории групп, решается сравнением с практикой.

Иногда групповые представления не могут вполне объяснить некоторых из наблюдаемых свойств. Например, было обнаружено, что нарушение симметрии происходит при наложении внешнего магнитного поля. В данном конкретном случае было высказано предположение, что волновая функция электрона преобразуется при вращениях по другому представлению группы. Находят применения свойства представлений групп $S(n)$, $O^+(3)$, $U(n)$ и их подгрупп.

Полученные в теории представлений результаты используются для классификации состояний многоэлектронного атома.

Одним из важных приложений теории групп к квантовой механике является установление правил отбора, под которыми понимают критерий, позволяющий судить, может ли быть отличным от нуля матричный элемент некоторого оператора, если известно, по каким представлени-

ям рассматриваемой группы преобразуется этот оператор и волновые функции. В теории излучения этот критерий применяется к матричному элементу оператора взаимодействия с электромагнитным полем и используется для определения вероятности перехода квантомеханической системы из одного стационарного состояния в другое [20]. Свои правила отбора разрабатываются для исследования рассеяния света молекулами, поглощения и излучения света атомами [21].

Широкий обзор применения теории групп в молекулярной, атомной физике и физике элементарных частиц содержится в книге Л. Мишель и М. Шааф [22]. Физические приложения позволяют математикам узнать, какие математические понятия играют наиболее существенную роль в современной физике. В то же время приложения дают физикам возможность изложения основ теории в несколько необычном для них аспекте с использованием самого современного математического языка. Обзор М. Шаафа из второй части книги [22], посвящен наиболее важной для физики элементарных частиц и довольно интересной с математической точки зрения группе – группе движений четырехмерного псевдоэвклидова пространства (неоднородная группа Лоренца, или группа Пуанкаре). М. Шааф рассматривает неприводимые унитарные представления группы Пуанкаре и ее подгрупп.

Для описания адронов в первом приближении используется симметрия $SU(3)$ и симметрии более высокие, такие как прямое произведение $SU(3) \times SU(3)$. Эта симметрия становится точной в случае пренебрежения массой O^- -мезонов. Это приближение соответствует подгруппе $SU(2) \times SU(2) \times U(1)$ группы $SU(3) \times SU(3)$ [10].

Метод аппроксимации принимает во внимание наиболее характерные и важные свойства системы, к которым относятся свойства симметрии, вытекающие из них законы сохранения. Многие утверждения, используемые в физике твердого тела, в сущности, только на них и основаны. При сужении физической задачи к исследованию составляющей ее основу симметрии возможно изучения только частичной информации о веществе, однако полученная информация в этом случае будет точной в зависимости от точности наших представлений о симметрии. Хорошо развитый раздел теории симметрии как раз и называется теорией групп. В тридцатых годах двадцатого века пошли разговоры о «групповой чуме», угрожающей теории твердого тела [23].

Находят применение в квантовой физике точечные группы вращений и отражений, оставляющих некоторую точку инвариантной. Все оси вращения пересекаются в этой точке и все плоскости отражений ее содержат. Циклическая группа C_n используется для рассмотрения вращений на угол $2\pi/n$. Группа D_n получается из группы C_n присоединением к ней оси второго порядка, перпендикулярной к n -кратной оси [23].

Теория групп дает возможность единообразного подхода к большому числу задач физики твердого тела, в которых важны свойства трансляционной и вращательной симметрии решетки.

Теория групп дает точный математический язык для описания симметрии, классификации свойств сложных систем.

Соображения симметрии в квантовой механике помогают классифицировать состояния и описывать трансформационные свойства волновых функций [24].

Многие молекулярные системы обладают той или иной пространственной симметрией. Это обстоятельство позволяет значительно упростить процесс решения уравнения Шредингера, используя аппарат теории групп. Применение теории групп при решении уравнения Шредингера основано на выделении тех сторон и особенностей решений, которые обусловлены только симметрией системы, симметрией поля, в котором движутся электроны. Последовательный учет симметрии необходим для классификации одноэлектронных состояний и состояния всей системы. Эта классификация опирается на теорию представлений групп. Особо важную роль теория групп приобретает при установлении правил отбора для переходов между различными

состояниями и при рассмотрении расщепления термов, когда симметричная система подвергается воздействию внешних возмущений, обладающих более низкой симметрией [25].

Для исследований в современной авиационной науке активно используются математические модели. Для решения задач прочности, исследования упругих и пластических деформаций элементов конструкции самолёта полезны методы теории групп, уравнений математической физики, дифференциальных уравнений, комплексного анализа, вычислительной математики. Задача решения дифференциальных уравнений, описывающих явления природы, в том числе численными методами, является центральной во взаимодействии физики и математики.

Заключение

Рассмотрены приложения математики, в частности, теории графов и теории групп в физике и химии.

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания Института вычислительного моделирования СО РАН (базовый проект FWES-2024-0025). Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение 075-02-2025-1790).

Acknowledgment. The work was performed in the framework of the state assignment of Institute of Computational Modelling of Siberian Branch of RAS, project FWES-2024-0025. This work is supported by the Krasnoyarsk Mathematical Center and financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-02-2025-1790).

Библиографические ссылки

1. Химические приложения топологии и теории графов. М. : Мир, 1987. 560 с.
2. Применение теории графов в химии. Новосибирск : Наука, 1968. 306 с.
3. Mathematical techniques for graph descriptors, entropies, spectra, and properties of oxalate-based metal organic frameworks / M. Arockiaraj, J. Fiona, C. Doss et al. // Journal of Mathematical Chemistry. 2025. Vol. 63. P. 787–815.
4. Terminology of metal-organic frameworks and coordination polymers / S. R. Batten, N. R. Champness, X. M. Chen et al. // Pure and Applied Chemistry. 2013. Vol. 85 (8). P. 1715–1724.
5. Yagi O. M., Guangming L., Hailian L. Selective binding and removal of guests in a microporous metal-organic framework // Nature. 1995. Vol. 378 (6558). P. 703–706.
6. Некрылов С. С., Кузьмин С. Ю. Математика на службе у химии или использование математических законов в химических процессах // Современные наукоемкие технологии. 2014. № 5-2. С. 227–228.
7. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М. : Мир, 1983. 397 с.
8. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М. : Мир, 1989. 496 с.
9. Chen H. Tutte polynomials for some chemical polycyclic graphs // Journal of Mathematical Chemistry. 2024. Vol. 62. P. 2625–2650.
10. Klavžar S., Romih G. The cut method on hypergraphs for the Wiener // Journal of Mathematical Chemistry. 2023. Vol. 63. P. 1592–1603.
11. Ziyun Zhou Guang Hu Applications of graph theory in studying protein structure, dynamics, and interactions // Journal of Mathematical Chemistry. 2024. Vol. 62. P. 2562–2580.
12. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике : курс лекций для физиков-теоретиков. М. : URSS, Ленанд, 2014. 360 с.
13. Иванов Е. Н. Теория групп и ее приложения в физике. М. : МИЭТ, 2006. 160 с.
14. Картонова Л. В. Основы кристаллографии. Владимир : Владимирский гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых, 2015. 80 с.
15. Вигнер Э. Теория групп и ее приложения к квантово-механической теории атомных спектров М. : Иностранная литература. 1961. 452 с.

16. Артамонов В. А., Словохотов Ю. Л. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии. М. : Академия, 2005. 512 с.
17. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. Изд. 3-е. М. : Либроком, 2010. 584 с.
18. Мадисон А. Е., Мадисон П. А., Мошников В. А. Концепция элементарных ячеек в теории квазикристаллов // Журнал технической физики. 2024. Т. 94, вып. 4. С. 561–574.
19. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. М. : Эдиториал УРСС, 2000. 280 с.
20. Вейль Г. Теория групп и квантовая механика. М. : Наука, 1986. 496 с.
21. Хейне В. Теория групп в квантовой механике. М. : Иностранная литература. 1963. 524 с.
22. Мишель Л., Шааф М. Симметрия в квантовой физике : пер. с англ. М. : Мир, 1974. 250 с.
23. Нокс Р., Голд А. Симметрия в твёрдом теле. Пер. с англ. М. : Наука, 1970. 424 с.
24. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. М. : Мир, 1983. Т. 1. 410 с.
25. Болотин А. Б., Степанов Н. Ф. Теория групп и её применения в квантовой механике молекул. М. : Изд-во Московского университета. 1973. 229 с.

References

1. *Khimicheskiye prilozheniya topologii i teorii grafov* [Chemical applications of topology and graph theory]. Moscow, Mir Publ., 1987, 560 p.
2. *Primeneniye teorii grafov v khimii* [Application of graph theory in chemistry]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1968, 306 p.
3. Arockiaraj M., Fiona J., Doss C., Balasubramanian K. Mathematical techniques for graph descriptors, entropies, spectra, and properties of oxalate-based metal organic frameworks. *Journal of Mathematical Chemistry*. 2025, Vol. 63, P. 787–815.
4. Batten S. R., Champness N. R., Chen X. M., Garcia-Martinez J., Kitagawa S., Öhrström L., O'Keeffe M., Suh M. P., Reedijk J. Terminology of metal-organic frameworks and coordination polymers. *Pure and Applied Chemistry*. 2013, Vol. 85 (8), P. 1715–1724.
5. Yagi O. M.; Li Guangming; Li Hailian. Selective binding and removal of guests in a microporous metal-organic framework. *Nature*. 1995, Vol. 378 (6558), P. 703–706.
6. Nekrylov S. S., Kuzmin S. Yu. Mathematics in the service of chemistry or the use of mathematical laws in chemical processes // Modern science-intensive technologies. 2014, No. 5-2, P. 227–228.
7. Flurry R. Symmetry groups. Theory and chemical applications. Moscow, Mir Publ., 1983, 397 p.
8. Hargittai I., Hargittai M. Symmetry through the eyes of a chemist. Moscow, Mir Publ., 1989, 496 p.
9. Chen H. Tutte polynomials for some chemical polycyclic graphs // *Journal of Mathematical Chemistry*. 2024, Vol. 62, P. 2625–2650.
10. Klavžar S., Romih G. The cut method on hypergraphs for the Wiener. *Journal of Mathematical Chemistry*. 2023, Vol. 61, P. 1592–1603.
11. Ziyun Zhou Guang Hu Applications of graph theory in studying protein structure, dynamics, and interactions. *Journal of Mathematical Chemistry*. 2024, Vol. 62, P. 2562–2580.
12. Lyubarskii G. Ya. *Teoriya grupp i yeye prilozheniya v fizike* [Group theory and its applications in physics]. Moscow, Gostekhizdat Publ., 1957, 354 p.
13. Ivanov E. N. *Teoriya grupp i yeye prilozheniya v fizike* [Group theory and its applications in physics]. Moscow, MIET Publ., 2006, 160 p.
14. Kartonova L. V. *Osnovy kristallografii* [Fundamentals of crystallography]. Vladimir, Vladimir State University named after A.G. and N.G. Stoletov Publ., 2015, 80 p.
15. Wigner E. *Teoriya grupp i yeye prilozheniya k kvantovo-mekhanicheskoy teorii atomnykh spektrov* [Group theory and its applications to the quantum-mechanical theory of atomic spectra]. Moscow, Foreign Literature Publ., 1961, 444 p.

16. Artamonov V. A., Slovokhotov Yu. L. *Gruppy i ikh prilozheniya v fizike, khimii, kristallografii: Uchebnik dlya studentov vuzov* [Groups and their applications in physics, chemistry, crystallography: Textbook for students of higher educational institutions]. Moscow, Academy Publ., 2005, 512 p.
17. Hammermesh M. *Teoriya grupp i yeye primeneniye k fizicheskim problemam* [Group theory and its application to physical problems]. Moscow, Mir Publ., 1966, 588 p.
18. Madison A. E., Madison P. A., Moshnikov V. A. The concept of unit cells in the theory of quasicrystals // *Journal of Technical Physics*. 2024, Vol. 94, Iss. 4, P. 561–574.
19. Petrashen M. I., Trifonov E. D. *Primeneniye teorii grupp v kvantovoy mekhanike* [Application of group theory in quantum mechanics]. Moscow, Editorial URSS Publ., 2000, 280 p.
20. Weyl G. *Group Theory and Quantum Mechanics*. Moscow, Nauka Publ., 1986, 496 p.
21. Heine W. *Teoriya grupp v kvantovoy mekhanike* [Group Theory in Quantum Mechanics]. Moscow, Foreign Literature Publ., 1963, 524 p.
22. Michel L., Schaaf M. *Simmetriya v kvantovoy fizike* [Symmetry in quantum physics]. Moscow, Mir Publ., 1974, 250 p.
23. Knox R. Gold A. *Simmetriya v tvordom tele* [Symmetry in solids. Trans. from English]. Moscow, Nauka Publ., 1970, 424 p.
24. Elliot J., Dauber P. *Simmetriya v fizike* [Symmetry in physics]. Moscow, Mir Publ., 1983, Vol. 1, 410 p.
25. Bolotin A. B., Stepanov N. F. *Group theory and its applications in quantum mechanics of molecules*. Moscow, Moscow University Moscow, 1973, 229 p.

© Сенашов В. И., 2025

Сенашов Владимир Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник; Институт вычислительного моделирования СО РАН. E-mail: sen1112home@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-8487-5688>

Senashov Vladimir Ivanovich – Dr. Sc., professor, leader researcher of Institute of Computational Modelling; Siberian Branch of RAS. E-mail: sen1112home@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-8487-5688>

Статья поступила в редакцию 04.04.2025; принята к публикации 23.04.2025; опубликована 13.10.2025
The article was submitted 04.04.2025; accepted for publication 23.04.2025; published 13.10.2025

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0
The article can be used under the Creative Commons Attribution 4.0 License