

# Euler, Cayley, ugljikovodici i predviđanje svojstava

F. M. Brückler, V. Stilinović

8. veljače 2008.

Teorija grafova se posljednjih godina ponovno intenzivno koristi u kemiji. Kažemo ponovno jer: kemija je bila jedan od bitnih pokretača razvoja teorije grafova u njenim počecima. Iako je prve rezultate iz teorije grafova dobio L. Euler, ta se matematička disciplina počela intenzivno razvijati u drugoj polovici 19. stoljeća radovima A. Cayleya potaknutim problemima enumeracije izomera.

Ovim predavanjem želimo dati pregled primjena teorije grafova u kemiji. Tradicionalni primjeri vezani su uz interpretaciju molekula kao grafova kojima vrhovi predstavljaju atome, a bridovi kemijske veze i uglavnom su prije svega kombinatorne prirode. U takve primjere spada već spomenuti problem enumeracije.

Moderniji primjeri se također većinom temelje na spomenutoj interpretaciji molekule kao grafa, ali se više koristi topološki aspekt teorije grafova. Najpoznatije primjene tog tipa bave se tzv. topološkim indeksima te topološkom kiralnosti.