

1	FORMALIZOVANÁ METODOLOGIE CHEMIE	7
2	GRAFOVĚ TEORETICKÝ PŘÍSTUP K FORMALIZACI POPISU MOLEKUL A JEJICH REAKCÍ	11
2.1	Molekulový graf	12
2.1.1	Izomerní molekulové grafy	13
2.1.2	Automorfismy molekulového grafu	14
2.1.3	Izomorfismus molekulových grafů	16
2.1.4	Chemická vzdálenost	17
2.2	Kanonické indexování vrcholů molekulového grafu	20
2.3	Grafy reakcí	23
2.3.1	Definice grafů reakcí	25
2.3.2	Seznam důležitých grafů reakcí	28
2.4	Generické reakce	31
2.4.1	Formální zavedení intaktních grafů	36
2.5	Princip minimální chemické vzdálenosti	37
3	MATEMATICKÁ FORMALIZACE VALENČNÍCH STAVŮ ATOMŮ A JEJICH KONVERZÍ	41
3.1	Obsah pojmu valenční stav atomu a jeho formální popis	41
3.2	Změny valenčních stavů atomů v průběhu chemických reakcí	42
3.3	Grafy konverzí valenčních stavů atomů	48
3.4	Možnosti využití grafů konverzí valenčních stavů atomů	50
3.4.1	Hledání dosud nepopsaných valenčních stavů atomů konkrétních prvků	50
3.4.2	Náměty nejkratších syntetických postupů	53
3.4.3	Vyhledání úplné množiny prekurzorů při retrosyntéze	55
3.4.4	Pracovní hypotézy reakčních mechanismů dosud neprozkoumaných reakcí	56
3.4.5	Vyvozování přehledu sloučenin daného prvku na základě valenčních stavů jeho atomů	57
3.4.5.1	Odvození tříd sloučenin, do nichž lze danou třídu převést chemickými reakcemi ..	62
3.4.5.2	Hledání společných reakcí sloučenin různých tříd	63
3.5	Význam valenčních stavů atomů pro formalizovanou metodologii chemie	65
4	ATOMOVÉ VEKTORY VE FORMALIZOVANÉM POPISU REAKČNÍCH CENTER MOLEKUL	67
4.1	Kvalitativní výběr potenciálních reakčních center v molekulách reaktantů	67
4.1.1	Výběr funkčních skupin	68
4.1.2	Rozklad struktur molekul na substruktury	70
4.1.3	Pravidla topologické priority	72
4.1.4	Uplatnění pravidel priorit atomových vektorů na počítači a jejich aplikace na konkrétní molekuly ..	74
4.2	Kvantitativní ohodnocení reakčních center v molekule	75
4.2.1	Soupis atomových vektorů a jejich parametrizace	75

4.2.2 Soubory struktur celistvých molekul jako reaktantů	81
4.3 Atomové vektory jako zobrazení reakčních center molekul	82
5 ÚLOHA REAKČNÍCH MECHANISMŮ V MATEMATICKÉM MODELU CHEMIE	85
5.1 Od grafů konverzí valenčních stavů atomů k reakčním mechanismům	85
5.2 Popis reakčních mechanismů pomocí grafů reakcí	89
5.3 Vztahy mezi mechanismy organických reakcí, vyplývající z grafové formalizace	92
5.4 Alfnumerický přepis reakčních mechanismů	102
5.5 Logické třídění reakčních mechanismů	106
5.5.1 Vektor vzdálenosti grafů reakčních mechanismů	108
5.5.2 Shluky grafů reakčních mechanismů	109
5.5.3 Vnošené grafy reakčních mechanismů	112
5.6 Přenos poznatků na další reakční soustavy	113
5.7 Význam modelů reakčních mechanismů pro formalizovanou metodologii chemie a pro počítačové řešení syntéz	115
6 MODELOVÁNÍ CHEMICKÝCH REAKCÍ	117
6.1 Modelování přímé syntézy	117
6.1.1 Izomerie souborů molekul	118
6.1.2 Výběr reagentů do souboru molekul eduktů EM_E	121
6.1.3 Model pro simulaci chemické reaktivity	127
6.1.4 Výběr v množině eduktů	131
6.1.5 Možnosti počítačového řešení syntéz v přímém směru	132
6.2 Modelování retrosyntézy	135
6.2.1 Zásady retrosyntézy	135
6.2.2 Grafový základ retrosyntéz	137
6.2.3 Strom retrosyntézy	137
7 SOUHRN	139
Literatura	142
Seznam a vysvětlivky použitých zkratk a symbolů	147