

OBSAH

FORMALIZMUS PRO POPIS CHEMICKÝCH REAKCÍ	10
TEORIE GRAFŮ PRO MATEMATICKÝ MODEL CHEMIE	11
Teorie grafů a topologie	11
Z teorie grafů	13
Reakční metrika	15
Grafy reakční vzdálenosti	17
Výpočet reakční vzdálenosti	20
Reakční graf	21
ROZKLAD A SKLÁDÁNÍ MOLEKULÁRNÍCH SYSTÉMŮ	23
Rozklad a skládání molekulových grafů	24
Molekulové grafy chemických struktur	26
POTENCIÁLNÍ REAKČNÍ CENTRA V MODELECH REAKCÍ	29
Vnitřní dispozice molekul k reakcím	30
Odpověď atomů v molekule na partnerský reagent	30
Reakční centra v molekulách	31
Prognostická úloha potenciálních reakčních center	32
Potenciální reakční centra v substrukturách	33
POJMY IZOMERIE A IZOMERACE V MODELU	37
Teorie grafů a topologie	37
Pojmy izomerie a izomerace v modelu	37
Reprezentace chemických struktur aparátem matematiky	39
Chemický strukturní vzorec je graf	39
Reprezentace chemických struktur	41
Matematický model synthonu	41
Lineární vektorový prostor	42
Molekulová matice BE	43
Maticový model synthonu	43
Reakční matice	44
Algebra matic	46
Lineární algebra a chemický graf	50
TOPOLOGIE STRUKTUR A SUBSTRUKTUR	53
Topologie struktur a substruktur	54
Soupravy molekulových grafů substruktur	55
Topologie běžných skeletů substrátů pro substituce	55
Molekulový graf jako synthon	56
Kombinace molekulových grafů substruktur a MG reagentů	60
Topologie skeletů a reakční centra	61
KONCEPT REAKČNÍHO GRAFU	67
Konstrukce molekulových grafů synthonů	68
Soubory grafů reakčních mechanismů	68

Obecné pokyny pro konstrukci grafů reakčních mechanismů G_{RM}	71
Souvztažnost grafů G_{RM}	76
Síťový graf a reakční vzdálenost	78
Skládání grafů G_{RM}	81
Objevitelská stránka skládání G_{RM}	85
Zobecňování souborných dějů	86
GRAFOVÉ MODELY REAKCÍ A REAKČNÍCH MECHANISMŮ	87
Chemická reakce je izomerací synthonů	87
Grafy reakcí	93
Definice grafů reakcí	94
Generické reakce	94
Grafové modely reakčních mechanismů	95
Reakční vzdálenost	96
Princip minimální reakční vzdálenosti	97
Graf reakční vzdálenosti	98
Informační vzdálenost a reakční grafy	102
Úlohy řešené modely reakčních grafů a grafů reakčních mechanismů	104
Náměty interakcí eduktů	108
PRINCIP PODOBNOSTI V MODELU	111
Princip podobnosti v modelu G_{RM}	112
Společné znaky mechanismů eliminací	115
Společné znaky mechanismů substitucí	117
Společné znaky mechanismů adicí	119
Informace obsažené v modelech reakčních mechanismů	124
Chemická podobnost a topologie	126
MATEMATICKÝ OPERÁTOR K VYVOZOVÁNÍ MODELŮ REAKČNÍCH MECHANISMŮ	129
Grafy v chemii jako heuristická pomůcka	129
Grafový přepis epizod EPI SAV	132
Kombinatorická analýza grafů reakčních mechanismů	133
GRAFY REAKČNÍCH MECHANISMŮ	137
Modely chemické reality	138
Notace reakčních mechanismů	138
Atlas modelů reakčních mechanismů	140
Řetězce ANCOD nukleofilních substitucí	141
Řetězce ANCOD elektrofilních substitucí	142
Řetězce ANCOD eliminačních reakcí	143
Řetězce ANCOD nukleofilních adicí	147
Řetězce ANCOD elektrofilních adicí	150
Řetězce ANCOD radikálových reakcí	152
Řetězce ANCOD smíšených reakcí	152
Predikční síla modelu	156
Jednota v různosti	160
FILOZOFIE MATEMATICKÉHO MODELU CHEMIE	163
Filozofie modelu	163

Hledání a reprezentování obecného	167
Operace nad aparátem matematického modelu	169
Podklady pro rozhodování o molekularitě reakcí	175
MODELOVÁNÍ VÍCESTUPŇOVÉ SYNTÉZY	179
Postup vyvozování vícestupňové syntézy	179
Modelování vícestupňové syntézy	179
Výběr v množině eduktů	183
Možnosti počítačového řešení syntéz v přímém směru	183
Modelování syntéz v přímém směru	183
Možnosti modelování retrosyntéz	184
Modelování retrosyntézy	184
Grafový základ retrosyntéz	185
Zásady retrosyntézy	185
Rozbor námětu retrosyntézy	186
Redukovaná množina syntetických prekurzorů a následníků (SPS)	187
Strom retrosyntézy	187
FYZIKÁLNÍ ZÁKLAD GRAFOVÉ TRANSKRIPCE CHEMIE	193
Formalizovaná metodologie chemie	194
Atom v molekule (aim)	194
Kódování informací	196
Aparát teorie grafů a formální popis atomů	198
Valenční stav atomu	169
Obsah pojmu valenční stav a jeho formální popis	200
Popis vazebné situace	201
Reakční centra jako dvouatomové synthony	208
Konverze valenčních stavů synthonů	208
Konverze vektorů dvouatomových synthonů	211
Přenos poznatků na další soustavy	219
Vektorová analogie	226
Další příklady vektorové analogie	228
Usuzování z analogie	229
Model poskytuje soupravy všech možných řešení	232
GENEZE A JEJÍ PROTAGONISTÉ	234
PRAMENY	235
REJSTRÍK	236