

# OBSAH

Úvodem: v čem je alternativní přístup	5
Obsah	7
Souhrn	9
Nová filozofie chemie	10
Matematická chemie	11
Princip všeobecné souvislosti	12
Fenomén podobnosti v organické chemii	14
Podobnost v lidském myšlení	14
Modelování podobnosti	17
Prototypy chemické podobnosti	17
Deskriptory molekulární podobnosti	19
Kvantové indexy molekulární podobnosti	23
Fuzzy podobnost	25
Parametrizace deskriptorů molekulární podobnosti	26
Chemická podobnost v isomerii	30
Rozšíření obsahu pojmu izomerie	32
GRAFY V CHEMII	36
Reprezentace chemických struktur aparátem matematiky	36
Chemický vzorec jako graf	36
Rozklad a kompozice molekulárních systémů	37
Molekulový graf v matematickém modelu a jeho rozklad	41
Soupravy molekulových grafů substruktur	43
Molekulový graf jako synthon	51
Reprezentace chemických struktur aparátem kvantové mechaniky	55
Molekulový graf v teorii AIM	55
Definice atomu a jeho vlastností	57
Atom v molekule	59
Stavba elektronových obalů atomů	61
Teorie atomu v molekule, AIM	61
Vlastnosti aim	63
Teorie molekulární struktury	69
Tvrdost atomu v molekule	97
Valenční stav atomu	105
Deskriptory valenčních stavů atomů	121
Transferabilita a aditivita aim	121
Konstrukce struktur molekul z fragmentů	122
Aditivita skupin, GA	126
Vazba v molekule	128
Lewisův model elektronové dvojice a Fermiho díra	129
Model VSEPR a topologie Laplacianu	132
Vazba v modelu AIM	132
Charakterizace chemické vazby v modelu teoretické chemie	133
Topologické vlastnosti vazeb	143
Předpoklady reprezentace chemické reakce	145
Vyhledání potenciálních reakčních center	146
Procesy probíhající na reakčních centrech molekul	152
Kvantově chemické modely vzniku a zániku vazby	152

Modely hraničních orbitalů a jejich interakcí	154
Molekula jako komunikační systém	158
Chemická vazba jako výsledek interakcí donoru/akceptoru	159
Elementární procesy na chemických vazbách	162
Charakteristiky hraničních orbitalů	163
Grafy pro modelování interakcí hraničních orbitalů	165
Soubor matic a subgrafů grafů reakčních mechanismů	169
Účetnictví valenčních elektronů	172
Elementární konverze valenčních stavů synthonů	173
Model elementárních kroků, EP	175
Grafy konverzí valenčních stavů atomů	180
Vektorová analogie	204
Konverze valenčních stavů synthonů	209
Geometrické znázornění AV ve dvouatomových synthonech	214
Elementární konverze dvouatomových synthonů	201
Elementární proces a epizoda, EP a EPI	211
Modely transformací dvouatomových synthonů	225
Hledání podobností a analogií	241
Subgrafy konverzí tříatomových synthonů	242
Grafově-teoretický model chemických reakcí	248
Charakteristika epizod EPI	248
Modelování reakčních mechanismů	255
Grafové modely reakčních mechanismů	256
Sestrojování molekulových grafů synthonů	262
Využití grafů reakčních mechanismů v prognóze reakčních podmínek	264
Popis grafů reakčních mechanismů a jejich hodnocení	267
Podobnost grafů reakčních mechanismů a jejich shlukování	273
Skládání grafů reakčních mechanismů	279
Kombinatorická analýza grafů reakčních mechanismů	284
Predikční schopnost modelu	287
Vstupy k modelování reakčních mechanismů	298
Model a reál	306
Fyzikalizace modelu	306
Průmět matematického modelu do chemické reality	307
Možnost vzniku vazby mezi partnerskými AIM	311
Reaktivita a selektivita ve vztazích reakčních center	311
Semiempirické indikátory parametrů reaktivity	313
Regioselektivita z výpočtů AIM měkkosti a Fukuiho indexů	316
Percepce reaktivity, filicity, selektivity a spinové multiplicity	320
Percepce reakčního centra reagentu	320
Selektivita karbenů	323
Spinová multiplicita	324
Percepce reakčního centra substrátu	326
Extenze modelování reakčních mechanismů na základě analogie	331
Prolínání	333
Samoorganizace systémů	342
Simulátor reaktivity	348
Příspěvek matematického modelu chemii	350
Literatura	352
Rejstřík	360