

Grafuri Moleculare

Rodica Rășinar

Liceul Tehnologic „Gheorghe Miron Costin” Constanța

Antoaneta Grasu

Liceul Toretic Negru Vodă, Constanța

Rezumat:

Un graf molecular este un model al unui sistem chimic, utilizat pentru caracterizarea interacțiunii componentelor sale: atomi, legături, grupuri de atomi sau molecule. Formula structurală a unei substanțe chimice poate fi reprezentată ca graf molecular, vârfurile lui fiind atomii, iar laturile corespunzând legăturilor covalente.

Teoria grafurilor aplicată în studiul structurilor moleculare se constituie ca ramură interdisciplinară numită topologie moleculară.

Caracterizarea topologică a structurilor chimice permite ordonarea acestora după criterii de simetrie și similaritate.

Din studii comparate, asupra unui set de molecule, topologia moleculară descifrează factorii structurali implicați în relația structură-proprietate/activitate biologică.