

# СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие редактора перевода .....	5
Предисловие к русскому изданию .....	9
Предисловие .....	10
ТОПОЛОГИЯ КОНЕЧНОГО ТОЧЕЧНОГО МНОЖЕСТВА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА. Р. Меррифилд, Х. Симmons .....	11
1. Введение .....	11
2. Конечная топология .....	12
2.1. Граф топологии .....	12
2.2. Качественные характеристики графовой топологии .....	14
2.3. Количественные характеристики графовой топологии: комбинаторика .....	16
3. Топология альтернатных молекул .....	18
3.1. Сложность структуры .....	18
3.2. Связность и делокализация .....	21
4. Топология неальтернатных молекул .....	25
4.1. Дуплекс графа .....	25
4.2. Топология дуплекса .....	27
Литература .....	27
СТЕРЕОХИМИЧЕСКАЯ ТОПОЛОГИЯ. Д. Волба .....	28
1. Введение .....	29
2. Подход к синтезу топологических стереоизомеров, основанный на лентах Мебиуса .....	31
2.1. Полный синтез первой молекулярной ленты Мебиуса .....	35
3. Критерии топологической стереоизомерии .....	37
3.1. Топологическая хиральность .....	37
3.2. Топологическая диастереоизомерия .....	41
4. «Клиппинг»-реакция (clipping reaction) и подходы к синтезу молекулярного трилистного узла .....	41
4.1. Разрыв ступеней мебиусовой лестницы .....	41
4.2. Молекулярный трилистный узел .....	42
Литература .....	45
КАЧЕСТВЕННАЯ СТЕРЕОХИМИЯ Дж. Дугунджи .....	47
1. Введение .....	47
2. Пермутационные изомеры .....	48
3. Группа химической идентичности .....	50
Литература .....	53

<b>ТЕОРИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ. Р. Бейдер .....</b>	<b>54</b>
1. Обзор теории .....	56
2. Некоторые приложения .....	64
Литература .....	71
<b>АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ И ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА КВАНТОВОЙ ХИМИИ, ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И НАГЛЯДНЫЕ ПРАВИЛА, ПОЗВОЛЯЮЩИЕ СДЕЛАТЬ КАЧЕСТВЕННЫЕ ПРОГНОЗЫ ДЛЯ ХИМИЧЕСКОЙ ПРАКТИКИ. О. Синаноглу .....</b>	<b>72</b>
1. Введение .....	73
2. Микрохимия или качественные квантовохимические правила, полученные непосредственно из структурных формул или диаграмм ORTEP .....	73
2.1. Поле векторного пространства валентностей $V_n(R)$ , существующее в евклидовом трехмерном пространстве $\varepsilon_3$ .....	74
2.2. Принцип линейной ковариантности в квантовой химии .....	76
2.3. Неунитарная классификация молекул .....	77
2.4. От структурных формул молекул к более детальным структурно-электронным формулам (и к графам) .....	80
2.5. «Структурная и деформационная ковариантность» молекул и графические правила для получения качественных квантовохимических результатов .....	81
3. Морфология реакционных механизмов, путей синтеза и топологические «правила стадия/соединение» .....	86
4. Особенности получения квантовых качественных характеристик каждой реакционной стадии механизма или пути реакции .....	89
Литература .....	89
<b>РЕАКЦИОННАЯ ТОПОЛОГИЯ: ТЕОРИЯ МНОГООБРАЗИЙ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН СИНТЕЗА. П. Межей .....</b>	<b>91</b>
1. Введение .....	91
2. Топологические многообразия, дифференцируемые многообразия и реакционная топология .....	93
3. Соотношения критических точек; графы пересечения в топологическом пространстве ( $M, T_C$ ) и квантовохимические схемы реакций .....	101
4. Вычислительные аспекты .....	106
5. Вырожденные критические точки и химические структуры, не отвечающие истинным минимумам ППЭ .....	108
6. Выводы .....	110
Литература .....	111
<b>ТОПОЛОГИЯ СВЯЗЫВАНИЯ В ПОЛИЭДРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ. Р. Кинг .....</b>	<b>117</b>
1. Введение .....	118
2. Основа концепции .....	119
3. Атомы вершин .....	120
4. Полиэдрические системы с локализованным связыванием .....	123
5. Системы с полностью делокализованным связыванием .....	124

6. Электронно-избыточные полиздрические системы .....	128
7. Электронно-дефицитные полиздрические системы .....	133
8. Аномальные вершины .....	134
9. Полиэдраны .....	138
10. Выводы .....	144
Литература .....	146
<b>ФОРМЫ КЛАСТЕРОВ ЭЛЕМЕНТОВ ГЛАВНЫХ ПОДГРУПП: ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К СЧЕТУ СКЕЛЕТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ.</b>	
<i>M. Мак-Глинчи, Й. Таль .....</i>	148
1. Введение .....	148
2. Кластеры с полностью делокализованным связыванием .....	149
3. Кластеры с локализацией связывания на ребрах .....	153
3.1. Шестиатомные кластеры .....	156
3.2. Семиатомные кластеры .....	158
3.3. Восьмиатомные кластеры .....	159
4. Квантово-топологическое обоснование полиздрической модели .....	161
5. Выводы .....	165
Литература .....	165
<b>ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕРЫ С АЗОТОМ.</b> <i>A. Тернер .....</i>	
1. Введение .....	167
2. Прототипная молекула — тетранитрид тетрасеры .....	168
3. Плоские циклические молекулы и ионы $S_n N_m$ .....	170
4. Неплоские системы — эквивалентность центров зарядового распределения .....	171
5. Применение теории функционала электронной плотности .....	173
Литература .....	181
<b>СЛЕДУЕТ ЛИ ЗАНИМАТЬСЯ РАЗРАБОТКОЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ?</b> <i>Д. Руверз .....</i>	
1. Введение .....	183
2. Индекс Винера .....	184
3. Конструирование индексов .....	186
4. Индексы матрицы расстояний .....	187
5. Индексы матрицы смежности .....	190
6. Центрические топологические индексы .....	191
7. Теоретико-информационные индексы .....	192
8. Составные топологические индексы .....	193
9. Некоторые математические соотношения .....	194
10. Форма и размер молекул .....	196
11. Основные применения индексов .....	197
12. Библиографическая классификация соединений .....	197
13. Определение физико-химических параметров .....	199
14. Разработка фармацевтических лекарственных препаратов .....	200
15. Выводы .....	202
Литература .....	203

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ, ОСНОВАННЫЕ НА СИММЕТРИИ ОКРЕСТНОСТЕЙ: ХИМИЧЕСКИЕ И БИОХИМИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ. В. Магнусон, Д. Харрис, С. Бейсак .....	206
1. Введение .....	206
2. Информационное содержание графа .....	210
2.1. Определения .....	210
2.2. Основные положения .....	211
2.3. Соотношение эквивалентности .....	212
2.4. Расчет других топологических индексов .....	213
3. Расчет индексов .....	213
4. Применения при исследованиях количественных корреляций структура — активность (ККСА) .....	217
4.1. Растворимость спиртов .....	217
4.2. Ингибирирование микросомального <i>пара</i> -гидроксилирования ацетилена спиртами .....	217
4.3. Токсичность ( $LD_{50}$ ) барбитуратов .....	218
Литература .....	220
 УПОРЯДОЧИВАНИЕ ГРАФОВ КАК ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЯМ КОРРЕЛЯЦИЙ СТРУКТУРА — АКТИВНОСТЬ. М. Рандич, Дж. Краус, Б. Дзонова-Джерман-Блазич .....	222
1. Введение .....	222
2. Основные принципы метода .....	224
3. Применение к веществам, обладающим антималярийным действием .	226
3.1. Построение последовательности цепей .....	227
3.2. Сравнение молекул А — М .....	230
4. Обсуждение .....	233
Литература .....	235
 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СЛОЖНОСТИ. С. Берти .....	236
1. Введение .....	236
2. Разработка модели .....	237
2.1. Теория графов и молекулярная топология .....	238
2.2. Теория информации и молекулярная симметрия .....	242
3. Проверка модели .....	245
3.1. Ограничения модели .....	250
4. Надежность модели .....	251
5. Выводы .....	256
Литература .....	257
 МАТРИЦА РАССТОЯНИЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОАТОМЫ. М. Барриш, Дж. Яшари, Р. Лалл, В. Шривастава, Н. Тринайстич ..	259
1. Введение .....	259
2. Взаимосвязь между матрицей смежности и матрицей расстояний .....	260
3. Матрица расстояний для гетеросистем .....	261
Литература .....	265

КАНОНИЧЕСКАЯ НУМЕРАЦИЯ И СИСТЕМА ЛИНЕЙНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ ХИМИЧЕСКИХ ГРАФОВ. У. Херндон .....	266
1. Введение .....	266
2. Каноническая нумерация .....	268
3. Однозначные линейные обозначения .....	271
4. Каноническая нумерация регулярных графов .....	273
5. Выводы .....	275
Литература .....	276
СИММЕТРИЯ И СПЕКТРЫ ГРАФОВ. ИХ ПРИМЕНЕНИЯ В ХИМИИ. К. Баласубраманиан .....	278
1. Введение .....	278
2. Обрезка деревьев .....	279
3. Обрезка деревьев и группы симметрии деревьев .....	281
4. Спектральные полиномы деревьев, получаемые с помощью процесса обрезки .....	283
5. Применения в химии .....	285
Литература .....	286
ГРУППЫ АВТОМОРФИЗМОВ НЕКОТОРЫХ ХИМИЧЕСКИХ ГРАФОВ. Г. Джонс, Э. Ллойд .....	288
1. Введение .....	288
2. Некоторые графы и их группы .....	289
3. Реакционные графы .....	291
3.1. Пример 1: механизм Берри .....	292
3.2. Пример 2: 1,2-сдвиги в карбониевых ионах .....	293
3.3. Пример 3: 1,2-сдвиги в гомотетраздранильных катионах .....	294
3.4. Пример 4: диагональные твисты в октаэдрических комплексах .....	296
3.5. Пример 5: 1,3-сдвиги в гомотетраздранильных катионах .....	297
4. Суборбитальные графы .....	298
5. Выводы .....	302
Литература .....	303
ПРОБЛЕМА РЕКОНСТРУКЦИИ. У. Тамт .....	304
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РИМАНОВЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ МЁБИУСОВСКИХ СИСТЕМ. А. Дей, Р. Маллон, М. Ригби .....	309
1. Введение .....	309
2. Формализм метода .....	310
3. Применение .....	315
4. Выводы .....	318
Литература .....	320
ГЛОБАЛЬНАЯ ДИНАМИКА НЕКОТОРЫХ КЛАССОВ РЕАКЦИОННЫХ СИСТЕМ. Х. Оттер .....	322
1. Введение .....	322
2. Теоретико-графовая формулировка .....	325
2.1. Структура управляющих уравнений .....	325

2.2. Некоторые понятия теории графов .....	327
2.3. Инварианты реакции .....	332
2.4. Существование стационарных состояний .....	335
3. Вершинно-управляемые сети .....	341
3.1. Постоянные входные потоки .....	341
3.2. Периодические входные потоки .....	345
4. Выводы .....	346
Литература .....	348
 «ЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ» В СРАВНЕНИИ С «НЕПРЕРЫВНЫМ ОПИСАНИЕМ» СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ПЕТЛИ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ: СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ЗАПАЗДЫВАНИЯМИ ПО ВРЕМЕНИ И ПАРАМЕТРАМИ. Р. Томас .....	349
1. Введение .....	349
2. Логическое описание систем, содержащих петли обратной связи .....	351
2.1. Запаздывания «включения» и «выключения» .....	352
2.2. Логические уравнения .....	353
2.3. Таблицы состояний .....	353
2.4. Цепи (последовательности состояний) .....	355
2.5. Анализ устойчивости .....	357
3. Непрерывное описание .....	358
3.1. Логические запаздывания по времени и непрерывные параметры .....	360
Литература .....	365
 КАЧЕСТВЕННАЯ ДИНАМИКА И УСТОЙЧИВОСТЬ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИОННЫХ СИСТЕМ. Б. Кларк .....	367
1. Введение .....	367
2. Задание химической системы .....	368
3. Масштабы времени — удаление веществ, реагирующих слишком быстро и слишком медленно .....	371
4. Теория химических сетей .....	373
5. Динамика системы .....	375
6. Многообразие стационарных состояний .....	376
7. Простые теоремы для анализа сетей .....	379
8. Более глубокое обсуждение стационарных состояний и их существования .....	382
9. Правильность .....	385
10. Однозначность .....	385
11. Глобальное притяжение .....	386
12. Сети, в которых многообразие $M$ не является правильным, однозначным и глобально притягивающим .....	388
13. Топология сети и устойчивость .....	389
14. Заключительные замечания .....	390
15. Приложение .....	390
15.1. Универсальные функции .....	392
15.2. Функции для символьной обработки и расчета матрицы токов ..	393
15.3. Функции, проверяющие выполнение теорем, и родственные функции .....	400
15.4. Отдельные функции .....	404
Литература .....	405

ВЫСШИЙ ХАОС В ПРОСТЫХ РЕАКЦИОННЫХ СИСТЕМАХ. О. Ресслер, Дж. Хадсон .....	407
1. Введение .....	407
2. Метод порождения обыкновенного хаоса .....	408
3. Метод порождения высшего хаоса .....	411
4. Обсуждение .....	412
Литература .....	413
 СТРАННЫЕ АТТРАКТОРЫ В ЛИНЕЙНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПЕРЕ- ДАТОЧНЫХ ФУНКЦИЯХ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ВОЗМУЩЕНИЯМИ. Х. Дегн .....	415
1. Введение .....	415
2. Результаты .....	416
Литература .....	421
 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕ- НИИ СТРУКТУРНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ. Р. Лартер .....	422
1. Введение .....	422
2. Метод .....	423
2.1. Стандартная теория .....	424
2.2. Модифицированная теория .....	425
3. Результаты .....	426
3.1. Начальные условия .....	426
3.2. Константы скорости .....	429
3.3. Более сложные ситуации .....	430
Литература .....	430
 ПРЕДСТАВЛЕНИЕ $n$ -МЕРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ МНОГООБРАЗИЙ С ПО- МОШЬЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ. Л. Пьюзнер .....	431
1. Введение: топологический и геометрический анализ химических про- цессов .....	431
2. Основные геометрические свойства $n$ -мерных метрических многооб- разий .....	432
3. Представление в виде сети .....	433
4. Пример для двумерной системы .....	436
5. Оптимальные пути .....	438
6. Пример использования химической сети для линейных переходов между множественными состояниями .....	440
7. Вариационные сети .....	443
Приложение: анализ сетей .....	444
Литература .....	444
 ЛОГИКА ХИМИЧЕСКИХ ИДЕЙ. П. Плат, Е. Хасс .....	445
1. Введение .....	445
2. Топологияperiодических реакций .....	445
3. Решетки periодических реакций .....	447
4. Ортомодулярные и булевы реакционные четырехмерные решетки .....	452
5. Выводы .....	455
Литература .....	456

<b>МНОГОМЕРНАЯ <math>\lambda</math>-МОДЕЛЬ. ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВЫЙ И АЛГЕБРАИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ МЕХАНИЗМОВ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ. Е. Хасс, П. Плят .....</b>	457
1. Введение .....	457
2. Однопараметрическая $\lambda$ -модель .....	459
3. Многомерная $\lambda$ -модель .....	463
3.1. Реакционные пути для [2 + 2]-циклоприсоединений .....	467
4. Выводы .....	470
Литература .....	470
<b>КЛАССИФИКАЦИЯ МЕХАНИЗМОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ С ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ЗРЕНИЯ. П. Селлерс .....</b>	472
1. Введение .....	472
2. Пример Мильнера .....	473
3. Механизмы без циклов .....	475
4. Другие механизмы .....	477
5. Множественные суммарные реакции .....	478
6. Выводы .....	480
Литература .....	480
<b>ГРАФЫ, МОДЕЛИ ПОЛИМЕРОВ, ИСКЛЮЧЕННЫЙ ОБЪЕМ И ХИМИЧЕСКАЯ РЕАЛЬНОСТЬ. Д. Клейн, В. Зайтц .....</b>	481
1. Введение .....	481
2. Изолированные линейные цепи .....	483
3. Подсчет изомеров .....	485
4. Конформации разветвленных полимеров .....	489
5. Теория скейлинга .....	489
6. Матрицы переноса .....	491
7. Самоподобие и переформировка .....	493
8. Обсуждение .....	495
Литература .....	497
<b>ФУНКЦИЯ ОБЪЕМА ДЛЯ ВОДЫ, ОСНОВАННАЯ НА МОДЕЛИ СЛУЧАЙНОГО ПОДГРАФА РЕШЕТКИ. Л. Квинтас .....</b>	499
1. Введение и предварительные математические замечания .....	499
2. Модель случайных графов для воды .....	501
3. Функция объема для воды .....	503
4. Соответствие $V(p)$ численным данным .....	504
5. Заключительные замечания .....	506
Литература .....	507
<b>ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ФЕРМЕНТ-СУБСТРАТНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ. С. Сваминатан .....</b>	508
1. Проблема фермент-субстратного распознавания .....	508
2. Модель Эдельштейн — Розена .....	510
3. Метод феноменологического исчисления .....	512
4. Гильбертово пространство описания .....	512
5. Постулаты для динамики сложных систем .....	514
6. Модель фермент-субстратного распознавания .....	515
7. Заключительные замечания .....	517
Литература .....	517

<b>ДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ РНК. X. Мартинец .....</b>	<b>518</b>
1. Введение .....	518
2. Методы минимизации энергии .....	521
3. Метод моделирования .....	525
4. Выводы .....	529
Литература .....	529
<b>ПРОГРАММА НА ЯЗЫКЕ ЛИСП ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНО-ФРАГМЕНТНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ИХ ГЕОМЕТРИИ. К. Триндл, Р. Гиван .....</b>	<b>530</b>
1. Введение .....	530
2. Лисп — язык нечислленного программирования .....	531
3. Представление молекул с помощью языка лисп .....	533
4. Неформальный алгоритм распознавания фрагментов .....	534
5. Некоторые специальные проблемы .....	538
6. Построение матрицы расстояний с помощью банка данных о фрагментах .....	539
7. Факторный анализ и алгоритм Криппена определения геометрии через расстояния .....	540
8. Выводы и перспективы .....	541
Литература .....	543
Предметный указатель .....	544