

《化学图论及应用》开栏语

高 炜

化学图论起源于早期化学实验的统计结果, 当时有化学家从大量的实验结果中发现, 化合物的特性与其分子结构密切相关. 由此, 科学家设想通过化合物的分子结构来获取其化学特征 (比如: 熔点、沸点、毒性、生物活性等), 进而化学图论作为数学和化学的交叉学科诞生了. 其基本方法是对化合物的分子结构进行建模, 每个原子用一个顶点表示, 原子之间的化学键用顶点之间的边来表示, 从而整个分子结构就用一个图来表示, 这样的图称为分子图. 在每个图上定义拓扑指数 (早期著名的指数有维纳指数、PI 指数等), 再通过拓扑指数的计算来获取分子结构对应化合物的特性.

化学图论经过近 40 年的发展, 目前已成为理论化学的重要研究课题之一, 并受到化学家、药学家、生物学家、材料学家的广泛关注. 由于该方法无需化学实验设备和试剂, 因此受到不发达国家和地区科学家的青睐, 特别是在东南亚、中东、南美洲和非洲地区, 人们在缺乏实验经费、设备和试剂的条件下, 可通过分子结构拓扑指数的计算和分析, 获取和实验条件下一致的结果, 于是该方法被广泛应用于药物、大分子聚合物、新材料的研究中. 此外, 在制药学和纳米材料学的反向工程中, 科学家希望得到满足某种特定性能的药物或纳米材料, 通过对某类拓扑指数 (对应药物或材料的某种特性) 极值的计算, 从数学的角度获取目标化合物的结构信息, 进而有目标的进行化学合成. 从这一意义上来说, 化学图论中的理论结果对反向工程有积极的实践指导意义. 同时, 这也使得化学图论成为理论药学和理论纳米学的重要研究分支.

基于此, 《昆明学院学报》现开设《化学图论及应用》栏目, 报道化学拓扑指数计算、指数极值和对应分子极图刻画、在新药物和纳米材料中的应用、疾病控制来源与基因定位等最新研究成果, 为数学、化学、生物、制药、材料等领域的相关学者提供一个交流新思想、新方法和展示新成果的平台, 同时对促进该学科的发展也具有积极的意义.