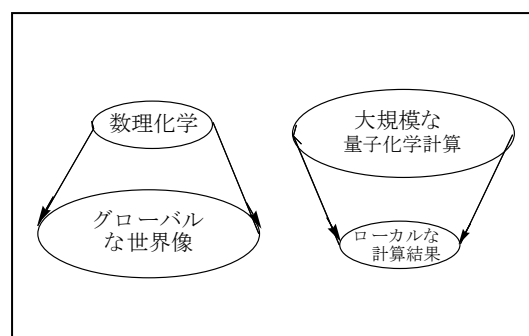


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	2. 情報化学
中項目	2-1. 数理化学
小項目	2-1-1. グラフ理論

概要（200字以内）

量子力学の第一原理から出発する大規模精密計算は、個別的には実験結果を凌駕するような結果が得られても、多くの物質や性質についてのグローバルな解釈や、その原因を的確に説明することはできない。それに対して、グラフ理論を中心とする数理化学的手法によって、有機電子論や芳香属性等の数理科学的な必然性を証明することができる。また、現在トポロジカルインデックスの数学的意味付けが確立されつつある。



現状と最前線

現在、トポロジカルインデックスは、単なる構造活性相関に関わるインデックスではなく、初等数学の代数と幾何学を融合させるための重要な概念で、それを利用することによって、種々の数学の定理が容易に証明されたり、他の概念との新しい関係が見出されたりしている。

参考文献

- H. Hosoya, From how to why. Graph-theoretical verification of quantum-mechanical aspects of π -electron behaviors in conjugated systems. Bull. Chem. Soc. Jpn., 76 (2003) 2233-2252.
- H. Hosoya, Mathematical meaning and importance of the topological index Z. Croat. Chem. Acta, in press.

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
トポロジカルインデックスの数学的及び数理化学的意味の確立
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
分子集合体の物理科学的諸性質の正確な予測

キーワード

グラフ理論的分子軌道法、トポロジカルインデックス、構造活性相関

(執筆者： 細矢治夫)