



Kombinatorika u kemiji

F. M. Brueckler*

Prirodoslovno-matematički fakultet
Matematički odsjek
Bijenička 30, 10 000 Zagreb

|| Sažetak

U ovome se članku ukratko opisuju osnovni kombinatorni principi (permutacije i kombinacije s ponavljanjem i bez ponavljanja) koji se primjenjuju u kemiji, s težištem na metodama enumeracije određenih tipova molekula. Posebno, kreće se od osnovnih pojmova teorije grafova te je opisano kako se mogu prebrojati neki tipovi grafova koji odgovaraju pojedinim klasama molekula.

|| Ključne riječi

Nastava kemije, kombinatorika, teorija grafova, molekulski grafovi, enumeracija izomera



Uvod: Kako je kemija potaknula nastanak jedne matematičke grane?

Više-manje opće je poznato da je mnogo toga u matematici otkriveno kako bi se riješili određeni praktični problemi, najčešće fizikalne ili tehničke prirode. Manje je poznato da je čitava jedna matematička grana, teorija grafova, doživjela svoj inicijalni procvat kako bi se riješili kemijski kombinatorni problemi. Da podsjetimo: kombinatorika je grana matematike koja se bavi prebrojavanjem koliko elemenata neki skup ima, npr. koliko različitih (strukturnih) izomera zadane formule postoji. Teorija grafova može se smatrati dijelom kombinatorike, ali zapravo se radi o grani na pograničnom području kombinatorike i topologije (topologija se bavi svojstvima geometrijskih objekata koja se ne mijenjaju pri neprekidnim transformacijama, primjerice rastezanju i zavrtanju, za razliku od transformacija s prekidima kao što su bušenje ili lijepljenje).

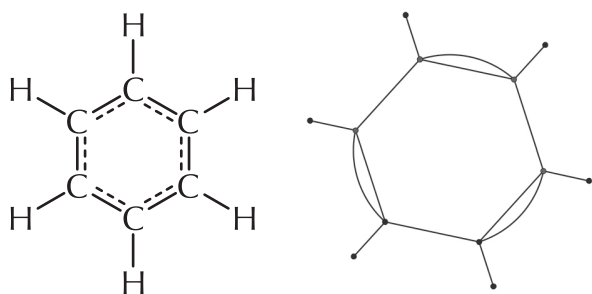
Prva pojava teorije grafova seže u 18. stoljeće, kad ju je utemeljio znameniti Leonhard Euler vezano za rješavanje jednog zadatka iz zabavne matematike. Ipak, teorija grafova nije se posebno razvila sve do 1870-ih godina, kad je engleski pravnik i matematičar Arthur Cayley iskoristio grafove kako bi riješio problem enumeracije alkana, tj. za

dani broj ugljika u alkanu utvrdio je koliko ima odgovarajućih strukturnih (konstitucijskih) izomera (to mu je uspjelo za alkane s 11 i manje atoma ugljika).

Možda se pitate kako tu mogu pomoći grafovi? Ako je to pitanje koje si postavljate, vrlo vjerojatno pod grafovima mislite na grafove funkcija, kakvi se crtaju u školi ili na fakultetu u sklopu predmeta tipa "matematička analiza". **Grafovi** o kojima ovdje govorimo nešto su potpuno drugačije. Oni se sastoje od nekog broja točaka (**vrhova**, možete ih zamisliti kao pojedine atome u molekuli) od kojih su neke povezane **bridovima** (možete ih zamisliti kao kemijske veze). Za svaki vrh u grafu broj bridova koji se u njemu sastaju naziva se **valencijom** (ili stupnjem) tog vrha.

Primijetimo da isti graf može odgovarati različitim molekulama. Primjerice, graf na slici 1 desno može predstavljati benzen, ali i klorbenzen, 1,3-diklorbenzen... Stoga je u pravilu potrebno pojedine vrhove označiti. U terminologiji teorije grafova prikladniji bi izraz bio obojiti: **obojeni graf** je graf u kojem je svakom vrhu pridružena po jedna od boja iz nekog danog skupa. Ako boje poistovjetimo s kemijskim elementima, slično kao što to radimo primjerice u kalotnim modelima, možemo reći da je **molekulski graf** obojeni graf koji predstavlja neku molekulu. Napomenimo da se obično postavlja zahtjev da su vrhovi obojenog grafa povezani bridom različitih boja. Ovdje nećemo to zahtijevati jer bi u molekulskoj interpretaciji to značilo da zabranjujemo vezu istovrsnih atoma.

* Autor za dopisivanje: Doc. dr. sc. Franka Miriam Brueckler
e-pošta: brueckler@math.hr

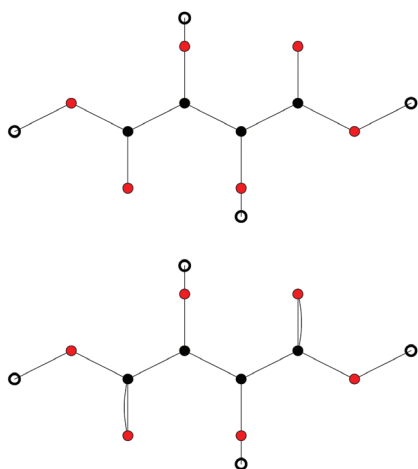


Slika 1 – Usporedba strukturne formule (lijevo) i molekuskog grafa (desno) benzena

Fig. 1 – Comparison of the structural formula (left) and the molecular graph (right) of benzene

U terminologiji teorije grafova alkani su molekule čiji grafovi su stabla. **Stabla** su povezani aciklički grafovi: povezani znači da su “u jednom komadu”, tj. prateći bridove možemo doći od svakog vrha do svakog; aciklički znači da ne postoji način da se tako vratimo u neki vrh, ako smo se uopće maknuli iz njega. Oprez: ako iz nekog vrha izlazi brid koji se u njega vraća, to se zove petlja i graf u kojem postoji petlja sigurno je ciklički. Kod molekuskih grafova to je nemoguće jer bi značilo da je neki atom povezan sam sa sobom.

Drugim riječima, stabla u molekuskim interpretacijama predstavljaju acikličke molekule. Tako primjerice molekuskim grafom benzena (slika 1 desno) nije primjer stabla (ali jest povezan), dok je molekuskim grafom vinske kiseline (slika 2) stablo ako ignoriramo višestruke veze, a nije stablo ako ih ne ignoriramo (jer onda posjeduje cikluse tipa C–O–C). Primijetimo da je u svakom stablu bar jedan vrh valencije 1. Takvi vrhovi zovu se **listovi** i u molekuskim grafovima obično predstavljaju atome vodika; preostale vrhove zvat ćemo unutrašnjim vrhovima stabla. Postoje različite primjene teorije grafova u kemiji,^{2,6,8} no ovdje ćemo se pozabaviti samo jednom.



Slika 2 – Molekuskim grafom vinske kiseline interpretiran kao stablo (gore) i s isticanjem višestrukih veza (dolje)

Fig. 2 – Molecular graph of tartaric acid interpreted as a tree (up), and with highlighted multiple bonds (down)

U današnje vrijeme problemi enumeracije u kemiji postaju sve zahtjevniji, jer se najčešće tiču velikih organskih molekula, tako da uz kombinatorna i “grafovskoteorijska” razmišljanja sve veću ulogu imaju i algoritmi. Tako su primjerice osmišljeni algoritmi koji generiraju sve moguće molekulske grafove zadane kemijske formule (oprez: to ne znači da su sve tako dobivene molekule već otkrivene, ako uopće postoje!). Ovdje se nećemo njima baviti, već ćemo čitatelju predočiti osnove kombinatornog zaključivanja u kemijskom kontekstu. Ipak, za kraj ovog uvoda napomenimo da enumeracija izomera nije korisna samo kao klasifikacija već može biti i poticaj za ideje novih sinteza – ako primjerice matematičkim metodama dobijemo ideju molekuskog grafa neke zasad nepoznate molekule.³

Permutacije i kombinacije

Osnovni kombinatorni termin koji uključuje prebrajanje pri kojemu su bitne pozicije nosi naziv **permutacije**. Permutacija nekog skupa (primjerice, atoma) je svaki način da elemente tog skupa nanižemo.* Ako treba poredati dva atoma, to možemo učiniti na dva načina: prvo jedan, pa drugi ili obrnuto. Tri atoma možemo poredati na 6 načina, a njih n na $n! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n$ načina. Ako pak samo biramo neke od raspoloživih objekata, govorimo o kombinacijama. Broj **k -kombinacija**, tj. različitih odabira k od raspoloživih n objekata, je “ n povrh k ”, $\binom{n}{k}$, broj koji ćemo ovdje definirati pomoću Pascalova trokuta (slika 3). U njemu su uz rub raspoređene jedinice, u svakom redu po jedna više, a brojevi između nastaju tako da zbrajanjem dva susjedna broja nekog reda dobijemo broj neposredno ispod njih. Broj $\binom{n}{k}$ nalazi se na k -toj poziciji u n -tom redu Pascalova trokuta, uz uvjet da redove i pozicije u njima brojimo od nule. Primjerice, $\binom{5}{2} = 10$.

		n=0		1						
		n=1		1	1					
		n=2		1	2	1				
		n=3		1	3	3	1			
		n=4		1	4	6	4	1		
		n=5		1	5	10	10	5	1	
		n=6		1	6	15	20	15	6	1

Slika 3 – Pascalov trokut

Fig. 3 – Pascal's triangle

Primjenjujući permutacije i kombinacije, možemo odgovoriti na pitanja poput sljedećeg:¹ Ako raspoložimo s n otopina i želimo testirati efekte učinke miješanja k od njih u različitim redosljedima, koliko pokusa treba napraviti? Da bismo odabrali k od n otopina, imamo $\binom{n}{k}$ mogućnosti. Za svaku od njih redosljed miješanja može biti neki od $k!$ njih. Kako za svaki odabir možemo odabrati bilo koji

* Formalno: Permutacija skupa S je svaka bijekcija sa S na S . Bijekcija je funkcija sa svojstvom da svakom elementu kodomene (“zavisnoj varijabli”) odgovara točno jedan element domene (“nezavisna varijabla”).

od redosljeda, odgovor na pitanje je umnožak navedenih brojeva, tj. $\binom{n}{k}k!$. Primjerice, ako smo imali na raspolaganju 5 otopina i želimo birati po 3 i miješati u različitim redosljedima, to možemo učiniti na $\binom{5}{3}3! = 10 \cdot 6 = 60$ načina. Pritom smo se koristili nečim što se u kombinatorici naziva **principom produkta**: ako nešto možemo napraviti na a načina, a nešto drugo na b načina, broj načina da napravimo oboje je ab . Čitatelja zainteresiranog za više na temu kombinatorike i teorije grafova upućujemo na literaturu.⁹

Izomeri, koliko vas je?

Prvo temeljno pitanje kombinatorne kemije je koliko postoji (strukturnih) izomera dane kemijske formule. Kako je u uvodu rečeno, upravo je to pitanje potaklo Cayleyja da razvije teoriju grafova. Pitanje djeluje jednostavno, ali je daleko od toga da bi odgovor bio jednostavan. Za "male" molekule odgovor je lako naći "na prste", ali za veće se stvari jako kompliciraju i postoji mnogo još neriješenih pitanja na tu temu... Ovdje ćemo zato samo kratko predstaviti osnovni način razmišljanja.

Pogledajmo prvo sljedeći primjer: za neki tip lančanog ugljikovodika, primjerice propan-1-ol, C_3H_8O , dozvolimo da se neki atomi ugljika ^{12}C zamijene izotopom ^{13}C , tj. razmatramo različite izotopomere lančanog ugljikovodika s danim brojem ugljikovih atoma.¹ U takvom slučaju trebaju nam **permutacije s ponavljanjem**. Možemo reći da se one tiču prebrajanja nizova dane duljine k (primjerice, tročlanih lanaca C-atoma) ako svaka pozicija u nizu može biti obojana u neku od n boja (primjerice, svaki od C-atoma može biti jedan od dva izotopa ^{12}C i ^{13}C). Takvih permutacija ima n^k . U našem primjeru, postoji $2^3 = 8$ načina da napravimo tročlani lanac iz dva ugljikova izotopa, no to je točno samo ako razlikujemo prvu od zadnje pozicije, tj. ako bismo razlikovali primjerice $^{12}C^{12}C^{13}C$ od $^{13}C^{12}C^{12}C$. Uzmemo li u obzir simetriju ta dva slučaja te $^{13}C^{13}C^{12}C$ i $^{12}C^{13}C^{13}C$, vidimo da imamo ne 8, već 6 izotopomera propan-1-ola, C_3H_8O .

Općenito, ako kao u prethodnom primjeru poistovjećujemo po dvije međusobno centralno-simetrične među permutacijama s ponavljanjem (npr. AAABA s ABAAA), dobit ćemo ukupno $n^k - n^{k/2} = n^{k/2}(n^{k/2} - 1)$ različitih permutacija za paran k , odnosno njih $n^k - n^{(k+1)/2} = n^{(k+1)/2}(n^{(k-1)/2} - 1)$ ako je k neparan. Zašto? Zato jer od broja svih (n^k) treba oduzeti broj "palindroma". U slučaju da je k paran, palindromi su određeni sa svojih prvih $k/2$ pozicija, a u slučaju da je k neparan, s njih $1 + k/2$.

Simetrija je samo jedan od razloga koji komplicira enumeraciju izomera. Recimo, brojimo li strukturne izomere alkana, razumni pristup (sličan izvornom Cayleyjevu) je da prebrajamo četverovalentna stabla (stabla čiji svi unutrašnji vrhovi imaju valenciju 4). Ako imamo n unutrašnjih unutrašnjih vrhova, možemo gledati načine da prvo njih "složimo" u stablo, tj. prebrajati stabla s n vrhova s valencijama 1 do 4 (jer će za svako tako dobiveno stablo biti očito s koliko je listova, tj. H-atoma, spojen koji vrh). Sustavno je tome najlakše pristupiti tako da gledamo najdulje putove u takvim stablima (put u grafu je niz oblika vrh–brid–vrh–brid–...–brid–vrh u kojem nema ponavljanja ni vrhova ni

bridova, a duljina puta je broj bridova u njemu).

Primjerice, razmatramo li izomere pentana, C_5H_{12} , zapravo se pitamo koliko različitih stabala imamo s 12 listova i 5 unutrašnjih vrhova valencije 4. Kako je upravo rečeno, pitanje se svodi na naizgled jednostavnije prebrojavanje koliko ima stabala s pet vrhova valencije najviše 4, a njih možemo sortirati prema najduljem putu u njima:

- Uočimo prvo da je u stablu s 5 vrhova nemoguće da je najdulji put duljine 1 ili 2.
- Ako je najdulji put duljine 3 (C–C–C), trebamo "zakačiti" još dva vrha (C-atoma), vidimo da nema smisla dodati po jedan vrh na svaki kraj (to bi bio put duljine 5), a ako pak spojimo jedan od dva vrha sa srednjim, a jedan s jednim od krajnjih vrhova, imali bismo put duljine 4. Preostaje varijanta da oba dodatna vrha spojimo sa srednjim vrhom u lancu, čime dobijemo prvi izomer (neopentan, 2,2-dimetilpropan).
- Ako je najdulji put duljine 4 (C–C–C–C), treba mu dodati još jedan vrh. Ako bismo ga dodali na jedan od dva kraja, dobili bismo put duljine 5, pa naizgled preostaju $2! = 2$ mogućnosti (spojiti peti C s jednim od dvaju srednjih u četveročlanom lancu), no lako je uvidjeti da ih nema smisla razlikovati, pa smo ovako dobili drugi izomer (izopentan, 2-metilbutan).
- Na kraju je lako: samo je jedno stablo s pet vrhova s maksimalnom duljinom puta 5 (C–C–C–C–C) pa imamo i zadnji izomer ("normalni" pentan, pentan).

I ovaj primjer, kao i onaj prije njega, pokazuje sljedeće: kod prebrajanja strukturnih izomera alkana C_nH_{2n+2} ne možemo jednostavno prebrajati stabla u kojima je maksimalni put duljine k (za k od 1 do n), jer će neki od odabira biti (simetrijski) ekvivalentni. Glavni razlog komplikacija u enumeraciji izomera je u simetrijskoj ekvivalenciji nekih među njima koje bismo dobili "čisto kombinatorno". Stvari se naravno općenito dalje kompliciraju ako molekulski grafovi koji nas zanimaju dopuštaju cikluse, a još više ako želimo razlikovati stereoizomere. Uz ignoriranje stereoizomera, pitanje je donekle riješeno za molekulske grafove koji su stabla. Konkrentno, poznati su brojevi strukturnih izomera alkana s 33 i manje atoma ugljika, a metoda određivanja temelji se na primjeni teorije funkcija izvodnica.^{5,9}

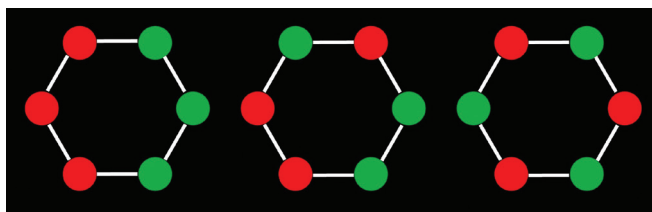
Isti graf, druga molekula

Vizualizirajmo molekulu metana: atom ugljika vezan s po jednom vezom s atomima vodika. Što ako uz vodike dopustimo da se na središnji ugljik veže i bilo koja od funkcionalnih skupina $-Cl$, $-CH_3$, $-C_2H_5$? Drugim riječima, koliko različitih molekula tipa CDEFG možemo imati ako svako od D, E, F, G može biti nešto iz skupa $\{H, Cl, CH_3, C_2H_5\}$? Slično, koliko molekula s molekulskim grafom kao na slici slici 1 desno imamo ako jednovalentni vrhovi mogu predstavljati bilo atome klora bilo vodika?

Pogledajmo prvo pitanje. Njega možemo "razbiti" na nekoliko manjih problema, razdvojivši sve razmatrane derivate prema broju vodika: 4, 3, 2, 1, 0.

- Očigledno imamo samo 1 slučaj s 4 vodika (metan).
- Ako imamo 3 vodika, zbog razloga simetrije samo trebamo vidjeti koji je od preostalih supstituenata na četvrtoj poziciji: od 3 supstituenta 1 možemo odabrati na $\binom{5}{1} = 3$ načina, pa smo dobili još 3 derivata.
- Ako imamo 2 vodika, potrebno je popuniti još dvije pozicije. Sada treba biti oprezan: ako su te dvije slobodne pozicije popunjene dvama različitim supstituentima od preostala tri, dobit ćemo dupliciranje (opet zbog simetrije), a ako je na obje isti, ne. Odnosno, možemo ignorirati redosljed i popuniti te dvije pozicije na $\binom{3}{2} + \binom{3}{1} = 3 + 3 = 6$ načina (po tri s dva različita ili samo jednim od preostalih triju supstituenata).
- Ako imamo samo jedan vodik, možemo ostale 3 pozicije popuniti na $\binom{3}{3} + \binom{3}{2} + \binom{3}{1} = 1 + 3 + 3 = 7$ načina: 1 sa sva tri različita supstituenta, čime smo dobili jedinstveni derivat (ovdje ignoriramo stereoisomere, odnosno ne razlikujemo enantiomerne parove) sa sva četiri različita supstituenta, 3 u kojima su uz jedan vodik dva različita supstituenta i 3 u kojima je na svim ostalim pozicijama osim vodikove isti supstituent. No u srednjem slučaju (dva supstituenta) zapravo smo prebrojali upola manje od potrebnih (očito su to slučajevi kad je na dvije pozicije jedan, a na jednoj poziciji drugi supstituent, no nismo razlikovali koji je koji). Stoga je točan broj derivata s jednim vodikom $\binom{3}{3} + 2\binom{3}{2} + \binom{3}{1} = 1 + 6 + 3 = 10$.
- Na kraju, ako gledamo molekule opisanog tipa bez vodika, imamo prebrajanje popunjenja četiri pozicije s po jednim od tri supstituenta. Mogli bismo opet, kao za vodik, odabrati jedan i razbiti problem na manje, što prepustamo čitatelju, te bismo tako dobili još 15 derivata. Dakle, odgovor na naše pitanje je $1 + 3 + 7 + 10 + 15 = 36$ derivata (odnosno 35 ako ne brojimo sâm metan).

Primijetimo da u svim ovakvim primjerima, uz kemijske vrste, presudnu ulogu imaju i njihove pozicije te simetrijski odnosi. Već smo komentirali kako se rješavamo dupliciranja ako je moguća samo centralna simetrija u lancu. U varijantama kad zaokretom dobivamo ekvivalentne rasporede, pomoći mogu tzv. **kružne permutacije**: Na koliko načina nekih n objekata možemo poredati u krug? Kako je kad ih poredamo svejedno od kojeg od njih n počnemo brojati, broj kružnih permutacija n objekata je $n!/n = (n-1)!$. Kemijskim problemima enumeracije bliže su kružne permutacije s ponavljanjem: ako primjerice u benzenu dopustimo zamjenu jednog ili više H-atoma atomima klora, imamo permutacije s ponavljanjem u kojima na svaku od šest pozicija raspoređenih u krug možemo staviti neku od dvije boje. Takvi su kružni rasporedi, kod kojih poistovjećujemo rotacijski ekvivalentne, u kombinatorici poznati pod nazivom **ogrlice** (duljine k u kojoj je svaka "perlica" jedne od n boja). U kemiji nam zapravo trebaju **narukvice**: narukvice su isto što i ogrlice, no tu poistovjećujemo rasporede koji su zrcalno simetrični s obzirom na ravninu u kojoj je nacrtana narukvica (vidi sliku 4).



Slika 4 – Tri narukvice koje su zapravo četiri ogrlice jer je srednja kiralna, pa bismo njezinim preokretanjem (zrcaljenjem) dobili ogrlicu koja se ne može ni iz koje od ovih triju dobiti rotacijom

Fig. 4 – Three bracelets which are in fact four necklaces because the central one is chiral, and thus its reflection results in a necklace not obtainable by rotating any of the three

Poznato je koliko je različitih ogrlica, odnosno narukvica, ako su zadane duljina k i broj različitih boja n , no objašnjenje nije jednostavno, te navodimo samo rezultate: broj različitih ogrlica je

$$O_n(k) = \frac{1}{k} \sum_{(d|k)} \varphi(d) n^{\frac{k}{d}}, \quad (1)$$

gdje $d|k$ znači "d dijeli k", tj. sumacija ide po svim djeliteljima duljine ogrlice, a za svaki od njih je $\varphi(d)$ broj prirodnih brojeva između 1 (uključivo) i d koji su relativno prosti s d , tj. takvi da je najveći zajednički djelitelj od d i takvog broja 1. Primjerice, $\varphi(9) = 6$ jer su među brojevima 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 njih 6 relativno prosti s 9 (to su 1, 2, 4, 5, 7 i 8). Zgodno je zapamtiti da je $\varphi(d) = d - 1$ ako je d prost broj.

Broj različitih narukvica je pak

$$N_n(k) = \begin{cases} \frac{1}{2} O_n(k) + \frac{1}{4} (n+1) n^{\frac{k}{2}}, & \text{ako je } k \text{ paran} \\ \frac{1}{2} O_n(k) + \frac{1}{2} n^{\frac{k+1}{2}}, & \text{ako je } k \text{ neparan.} \end{cases} \quad (2)$$

U našem primjeru s benzenom u kojem neki vodici mogu biti zamijenjeni klorom, treba nam broj narukvica duljine 6 s dvije boje "perlica" (boja H i boja Cl). Njih prema gornjim formulama ima

$$\begin{aligned} N_2(6) &= \frac{1}{2} O_2(6) + \frac{3}{4} \cdot 2^3 = 6 + \frac{1}{12} \sum_{d=1,2,3,6} \varphi(d) 2^{\frac{6}{d}} \\ &= 6 + \frac{1}{12} (\varphi(1) 2^6 + \varphi(2) 2^3 + \varphi(3) 2^2 + \varphi(6) 2^1) \\ &= 6 + \frac{1}{12} (64 + 8 + 2 \cdot 4 + 2 \cdot 2) \\ &= 13. \end{aligned} \quad (3)$$

Dakle, imamo 13 različitih klorobenzena.

Kako vidimo, neki posebni slučajevi enumeracije mogu se svesti na riješena kombinatorna pitanja. Ipak, očito je da smo odgovorima za prebrajanje permutacija s ponavljanjem kod kojih razlikujemo samo neekvivalentne s obzirom na centralnu, odnosno na rotacijsku i zrcalnu simetriju, samo dijelom pokrili tematiku. Općenit odgovor o

nalaženju broja molekula određenog molekulskog grafa uz zadani skup supstituenata rješava tzv. Pólya teorem enumeracije, koji kombinira teoriju grafova s kombinatorikom i teorijom grupa. U osnovi, radi se o prebrajanju permutacija uzimajući u obzir simetrije konfiguracije, što je – kako smo vidjeli u primjerima – jedan od glavnih problema u enumeraciji izomera. Opis principa izlazi iz opsega ovog članka, te do prilike da i njega opišemo, upućujemo čitatelja na literaturu.^{4,7,8,9}

Popis kratica i simbola

List of abbreviations and symbols

- $N_n(k)$ – broj narukvica duljine k i n različitih boja
– number of bracelets of length k and rank n
- $O_n(k)$ – broj ogrlica duljine k i n različitih boja
– number of necklaces of length k and rank n
- $\varphi(d)$ – broj relativno prostih brojeva i , $1 \leq i < d$
(Eulerova funkcija)
– number of relatively prime integers i , $1 \leq i < d$
(Euler's totient function)

Literatura References

1. D. Babić, predavanja iz kolegija "Matematičke metode u kemiji", 2007.
2. A. T. Balaban (ur.), Chemical Applications of Graph Theory, Academic Press, London, 1976.
3. J.-L. Faulon, D. P. Visco, D. Roe, Enumerating Molecules, <http://prod.sandia.gov/techlib/access-control.cgi/2004/040960.pdf> (15. 3. 2016.).
4. I. Gutman, B. Popović, Pólya – matematik ki je preštel grupe, grafe in kemijske spojine, Presek 32 (2-3) (2004/5) 36–37.
5. E. M. Rains, N. J. A. Sloane, On Cayley's Enumeration of Alkanes (or 4-Valent Trees), <https://cs.uwaterloo.ca/journals/JIS/cayley.html> (15. 3. 2016.).
6. N. Raos, Što nam mogu reći vrelišta alkana?, Kem. Ind. 65 (3-4) (2016) 175–178, doi: <http://dx.doi.org/10.15255/KUI.2015.039>.
7. R. C. Read, Polyá's Theorem and Its Progeny, <http://www.computing-wisdom.com/jstor/polya-theorem.pdf> (15. 3. 2016.).
8. N. Trinajstić, Chemical Graph Theory, 2. izd., CRC Press, Boca Raton, FL, 1992.
9. D. Veljan, Kombinatorika s teorijom grafova, Školska knjiga, Zagreb, 1989.

SUMMARY

Chemical Combinatorics

Franka Miriam Brueckler

The article gives an overview of basic combinatorial principles (permutations and combinations with and without repetitions) which are applied in chemistry, with the emphasis on methods for the enumeration of specific types of molecules. In particular, starting from the basic notions of the graph theory, it describes how to count certain types of graphs corresponding to certain classes of molecules.

Keywords

Chemical education, combinatorics, graph theory, molecular graphs, enumeration of isomers

Faculty of Science, Department of
Mathematics
University of Zagreb
Bijenička 30
HR-10 000 Zagreb, Croatia

Professional paper
Received March 16, 2016
Accepted May 15, 2016