

### Advances in Mathematical Chemistry and Applications

di S.C. Basak, G. Restrepo, J.L. Villaveces

Elsevier (Rev. Ed. 2016)

Vol. 1: Pag. 376, rilegato, 240 dollari,

ISBN 978-1-68108-198-4

Vol. 2: pag. 354, rilegato, 240 dollari,

ISBN 978-1-68108-053-6

disponibili anche in ebook

Nel 1894 il matematico tedesco Georg Helm coniò il termine "chimica matematica" con il trattato *Grundzüge der mathematischen Chemie (Principi di Chimica matematica)*. Da allora, vari studi sono stati compiuti per cercare di applicare la matematica alla chimica, sviluppando dei modelli matematici per la descrizione dei fenomeni chimici.

Oggi, le principali aree di ricerca della chimica matematica includono: i) la teoria chimica dei grafi, la quale si occupa dello studio matematico dell'isomeria e dello sviluppo di descrittori topologici, con applicazioni nelle relazioni quantitative struttura-proprietà; ii) gli aspetti chimici della teoria dei gruppi con applicazioni in stereochimica e in chimica quantistica e iii) gli aspetti di topologia molecolare. Recentemente, le iperstrutture algebriche sono state impiegate per la descrizione dei fenomeni catalitici.

Nel testo *"Advances in Mathematical Chemistry and Applications"* gli Autori riportano i recenti risultati ottenuti nel campo della chimica matematica, approfondendo i recenti sviluppi e le applicazioni ai vari ambiti della chimica, fisica e biologia in due volumi composti da 27 capitoli.

Ciascun volume include un'approfondita trattazione dei concetti matematici e considera le possibili applicazioni nei vari ambiti, tra cui quello dei nuovi farmaci, della bioinformatica, della chemioinformatica, della biologia computazionale, della proteomica matematica e dell'ecotossicologia. Sia gli aspetti teorici che pratici sono, infatti, di fondamentale importanza per la chimica matematica.

Il Volume 1 considera i descrittori matematico-strutturali di molecole e biomolecole, l'applicazione di insiemi parzialmente ordinati o poset (Partially Ordered Set) ai sistemi chimici, la descrizione dei sistemi molecolari interagenti mediante la teoria dei grafi, lo sviluppo di matrici di connettività, l'uso di impronte 2D nello screening virtuale, la realizzazione di approcci matematici per la descrizione di strutture molecolari complesse, l'applicazione della topologia molecolare per lo sviluppo di composti chimici, il metodo DFT (Density Functional Theory) per lo studio della reattività chimica, ecc.

Nel Volume 2 gli Autori approfondiscono le tematiche precedentemente introdotte e riportano ulteriori aspetti riguardanti la chimica matematica, sia dal punto di vista teorico che pratico. Vengono, pertanto, considerati gli aspetti topologici per la classificazione degli isomeri del fullerene, i sistemi complessi di reazioni chimiche, la descrizione di piccole molecole con descrittori molecolari topologici, i metodi GRANCH (Graphical Representation and Numerical Characterization) per la descrizione matematica di DNA, RNA e sequenze proteiche, i metodi di regressione lineare e le tecniche Bayesiane, i metodi predittivi per la valutazione della tossicità, la combinazione della bioinformatica con la biologia dei sistemi e le dinamiche molecolari, i modelli sui metalloenzimi, la periodicità molecolare, le proprietà delle topologie generalizzate e le loro possibili applicazioni, ecc. Nonostante i numerosi argomenti esposti, i due volumi risultano essere ben strutturati ed il test è un valido supporto per lo studio e l'approfondimento di tematiche riguardanti la chimica-matematica. *"Advances in Mathematical Chemistry and Applications"* presenta, infatti, una buona introduzione ad un settore in rapida espansione, permettendo al lettore di comprendere gli aspetti teorici della chimica-matematica grazie anche ad un costante riscontro applicativo.

Marco Piumetti

