

Chimica matematica

Approfondimenti	Info
Quest'argomento non è collegato ad altri approfondimenti correlati. Si consiglia, in ogni caso, di controllare sempre [l'Indice] degli <i>Approfondimenti</i>	Questa pagina è solo improntata in attesa di completamento da parte dei Collaboratori. Se sei interessato a collaborare attivamente con Extrapedia, leggi come fare [Collabora]

Chimica matematica è l'area di ricerca impegnata in nuove applicazioni della [Matematica](#) alla [Chimica](#); si occupa principalmente della modellizzazione matematica dei fenomeni chimici. La Chimica matematica è stata talvolta definita anche chimica dei computer, ma non dovrebbe essere confusa con la [Chimica computazionale](#).

Le principali aree di ricerca in Chimica matematica includono la teoria dei grafi chimici, che si occupa di topologia come lo studio matematico dell'isomerismo e lo sviluppo di descrittori o indici topologici che trovano applicazione nelle relazioni quantitative struttura-proprietà; e aspetti chimici della teoria dei gruppi, che trova applicazioni nella [Stereochimica](#) e nella [Chimica quantistica](#).

La storia dell'approccio può essere fatta risalire al XIX secolo. [Georg Helm](#) pubblicò un trattato intitolato "*I principi della chimica matematica: l'energetica dei fenomeni chimici*" nel 1894.

I modelli base per la Chimica matematica sono il grafico molecolare e l'indice topologico.

Nel 2005 l'International Academy of Mathematical Chemistry (IAMC) è stata fondata a Dubrovnik (Croazia) da [Milan Randić](#). L'Accademia contava 82 membri (2009) provenienti da tutto il mondo, tra cui sei scienziati premiati con un Nobel.

Extrapedia Science

« [Home](#) » - « [Indici Tematici](#) » - « [Indice Scienze Naturali](#) »

From:

<https://www.extrapedia.org/> - **Extrapedia**

Permanent link:

https://www.extrapedia.org/db/chimica_matematica

Last update: **13/06/2021 17:12**

