

Távolságfüggő molekuláris deszkriptorok*§

Bono Lučić, Sonja Nikolić and Nenad Trinajstić**

The Rugjer Bošković Institute, P.O. Box 180, HR-10002 Zagreb, Croatia

1. Bevezetés

Nagyon érdekelték Lukovits Istvánt a távolságfüggő molekuláris deszkriptorok [pl. 1-8]. Különösen sokat foglalkozott a Wiener-index és a hiper Wiener-index matematikai és számítástechnikai tulajdonságaival szerkezeti-aktivitás-tulajdonság modellezések során [pl., 1-4, 9-13]. Velünk is együttműködött számos, gráfelméleti távolságon alapuló, molekuláris deszkriptorral foglalkozó programban [pl., 14-19]. Itt, Lukovitsra és távolságfüggő deszkriptorok területén kifejtett munkásságára emlékezve ismertetünk több olyan deszkriptort, amelyek levezetésében ő is aktívan részt vett. Azt is említsük meg, hogy Lukovitsot a kémiai gráfelmélet akkor fogta meg, amikor Živković és Trinajstić egy mátrafüredi konferencián, 1974-ben tartott előadását hallgatta. Ezen két szerző előadásukból készített egy közös közleményt is amely Náray-Szabó Gábor professzor értő fordításában magyarul jelent meg [20].

Mielőtt továbbmennénk, összefoglaljuk azokat az alapvető gráfelméleti fogalmakat, melyeket használni fogunk. Meghatározásukra felhasználtuk Harary [21] és Wilson [22] könyveit, továbbá Trinajstić [23] valamint Gutman és Polansky [24] monográfiáit. Formálisan egy G gráfot a $[V(G), E(G)]$ párral definiálunk, ahol $V(G)$ a csúcsok nem üres véges halmaza és $E(G)$ a $V(G)$ csúcsok (nem feltétlenül különböző) rendezetlen párpárjainak a véges halmaza. Ezeket a párokat éleknek hívjuk. A molekula szerkezetét leíró molekuláris gráfokban a csúcsok jelképezik az atomokat és az élek a kötések. Összefüggő molekuláris gráfokat fogunk vizsgálni. Egy gráf összefüggő, ha bármely két csúcsa úttal összeköthető. A gráfelméleti távolságon a G gráf bármely két csúcsa között a legkevesebb élet tartalmazó utat értjük. A detour-távolság a leghosszabb út G bármely két csúcsa között az élek számában mérve. Nyilvánvaló, hogy a gráfelméleti és a detour-távolság körmentes (aciklikus, gyűrűmentes) gráfokban megegyezik. Egy szám a G gráf invariánsa, ha mindegyik G -vel izomorf gráfra ugyanazt az értéket veszi fel. A kémia gráfelméletben a molekuláris G gráf invariánsait molekuláris deszkriptoroknak hívják.

2. Néhány távolság-deszkriptor

2.1. Wiener-index

A legrégebbi gráfelméleti deszkriptor az 1947-ben bevezetett, W -vel jelölt Wiener-index [25]. Nevét felfedezője, Harry Wiener (1924-1998) után kapta, akinek munkásságát a

*Ezt munkát Dr Lukovits István (1945-2007) emlékének dedikáljuk, a kedves barátunk, kollégánk és igaz úriembernek, aki olyan sokat segített kutatómunkánkban. Igazi öröm volt vele együttműködni. Nagyon sajnáljuk, hogy ilyen korán eltávozott az életből.

§fordította László István

**Főszerző: e-mail: trina@irb.hr

kémia, majd az orvostudomány területén jól leírta Rouvray [26].

Sokféle módon kiszámíthatjuk a Wiener-indexet [2,27]. Wiener eredeti módszere csak körmentes szerkezetekre (fák) volt érvényes és tömören így hangzik: "Szorozd össze egy kiválasztott él két végén található csúcsok számát és összegezd ezt a mennyiséget minden élre". Ez képlettel a következő képen fejezhető ki. Legyen T egy (molekuláris) fa, mely N csúcsot tartalmaz és e az egyik éle. Legyen $N_1(e)$ és $N_2(e) = N - N_1(e)$ a csúcsok száma a $(T-e)$ gráf két részén. Ekkor az élek szerint tagolt formula:

$$W = \sum_e N_1(e) N_2(e) \quad (1)$$

Wienernek csak körmentes gráfokra érvényes, élek szerint tagolt formuláját Lukovits és Gutman 1994-ben általánosította kört is tartalmazó (ciklusos) rendszerekre [28]. Az általános, élek szerint tagolt formula a következő:

$$W = \sum_e \sum_{i < j} [p_{ij}(e)/p_i] \quad (2)$$

ahol p_{ij} azon utak teljes száma az i és j csúcsok között, melyek hossza $l(i,j)$. Azoknak a fenti utaknak a száma pedig, amelyek tartalmazzák az e élt $p_{ij}(e)$. Lukovits kifejlesztett egy hatékony algoritmust is a Wiener-index él járulékaiknak kiszámítására [4].

Hosoya 1971-ben [29] megadott gráfelméleti definíciója a Wiener-indexre számítástechnikailag sokkal egyszerűbb. Eszerint egy G molekuláris gráf W Wiener indexe megegyezik a \mathbf{D} távolságmátrix nem diagonális mátrixelem összegének a felével:

$$W = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{D}]_{ij} \quad (3)$$

ahol $[\mathbf{D}]_{ij}$ ábrázolja a legrövidebb út hosszát G -ben az i és j csúcsok között.

A G gráf \mathbf{D} távolság mátrixa az a valós szimmetrikus $V \times V$ mátrix, melyre [30]:

$$[\mathbf{D}]_{ij} = \begin{cases} l(i,j) & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (4)$$

ahol $l(i,j)$ a élek minimális száma G -ben i és j között. Nagy rendszerre a távolságmátrix felállítását meglehetősen bonyolult. Létezik igen hatékony számítógépes program a távolság mátrix és a Wiener-index kiszámítására [31].

A Wiener-index jelentős alkalmazásra került QSPR és QSAR vizsgálatokban [pl., 9,10,32-34].

2.2. Részleges Wiener-indexek

A következő kifejezés bevezetésével Lukovits [10] különböző kötéstípusok járulékat tanulmányozta a Wiener-indexben:

$$W = W_s + W_D + W_T + W_A \quad (5)$$

ahol W_s az egyes kötések, W_D a kettős kötések, W_T a hármas kötések, és W_A az aromás kötések járuléka a vizsgált molekulában.

2.3. Módosított Wiener-index

Az mW módosított Wiener-indexet az eredeti Wiener-módszer módosításával kaphatjuk: "Szorozd össze egy kiválasztott él két végén található csúcsok számának reciprokát és összegezd ezt a mennyiséget minden élre". Eszerint, az eredeti Wiener-féle, élek szerint tagolt formulának Nikolić *et al.* [35] által 2001-ben bevezetett módosítása így alakul:

$${}^mW = \sum_e \frac{1}{N_1(e)} \frac{1}{N_2(e)} \quad (6)$$

ahol mW jelöli a módosított Wiener-indexet. A fenti formula csak körmentes gráfokra használható és eddig csak meglehetősen korlátozottan került alkalmazásra.

2.4. HiperWiener-index

A WW hiper Wiener-indexet Randić [36] vezette be 1993-ban. Algoritmusában azonban csak körmentes szerkezetekre alkalmazható. Lukovits *et al.* [37,38] hamar megmutatta, hogy WW minden szerkezetre kiszámítható a következő formulával:

$$WW = (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \{ [D]_{ij} + [D]_{ij}^2 \} \quad (7)$$

Ez átírható, mint:

$$WW = W/2 + (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [D]_{ij}^2 \quad (8)$$

Lukovits fákat tanulmányozott extrémális hiper Wiener-indexek [39] segítségével és részt vett WW-index valamint változatainak kiszámítását adó algoritmusok tervezésében abból a célból, hogy aciklusos és ciklusos molekulák elágazásait megkülönböztessék és jellemezzék [3,12,40,41].

A hiper Wiener-indexet némi sikerrel alkalmazták QSPR modellezésben [pl., 16,32].

2.5. A Wiener-index multiplikaív változata

A G gráf $\pi(W)$ multiplikatív Wiener-indexe megegyezik a gráf összes csúcspárjára kiszámított legrövidebb távolságok szorzatával [42,43].

$$\pi(W) = \prod_{i < j} (D)_{ij} \quad (9)$$

Mivel ez az index még kis molekulák gráfjára is elég nagy, például 288 illetve 3456 pentánra valamint hexánra, a szerzők $\ln \pi(W)$ használatát javasolták $\pi(W)$ helyett QSPR modellezésekben.

2.6. Pasaréti-index

A Pasaréti-index egy összes út változata a Wiener-indexnek [6,8,17]. Definíciója:

$$P = \sum_{i < j} \sum p_{ij} \quad (10)$$

ahol p_{ij} jelöli az i és j csúcsok közötti utat, melynek távolsága $|p_{ij}|$. Az összegezés minden i és j csúcs párra és minden köztük lévő útra van kiterjesztve. A Pasaréti-indexet sikeresen alkalmazták szerkezettől függő forráspont meghatározására ciklusos és aciklusos szénhidrogénekben [17].

E szomorú alkalommal érdemes megemlíteni a Pasaréti-index kifejezés eredetét. Azért ez a neve, mert néhai Lukovits István lakásában lett megalkotva Budapest kedves körzetében, Pasaréten. Néhány évvel később Budapest egy másik részére költözött, ahol befejezte evilági napjait.

2.7. Vérhalom-index

A Pasaréti-index exponenciálisan függ a gráf csúcsainak N számától. Ez lehetetlenné teszi alkalmazását szerkezet-tulajdonság-aktivitás modellezésben, mivel túlságosan nagy értéket vesz fel a molekulák homológ sorozatán. Emiatt átalakították egy numerikusan sokkal inkább használható változattá, melynek neve Vérhalom-index és V a jele. Elég egyszerű a definíciója:

$$V = P/n \quad (11)$$

ahol n -et úgy kapjuk, hogy a molekuláris gráf összes útjának számát osztjuk $N(N-1)/2$ -vel.

A Vérhalom-index ugyanazon molekulákra és tulajdonságokra bizonyult sikeresnek, mint a Pasaréti-index [17].

Honnan kapta nevét a Vérhalom-index? Ez is kapcsolatban van egyikünk (N. T.) budapesti látogatásával. A Vérhalom-index néhai Lukovits István munkahelyi irodájában, a Magyar Tudományos Akadémia Központi Kémiai Kutató Intézetében, Budapest Vérhalom körzetében lett megalkotva. Innen a neve.

2.8. Harary-index

A Harary-index-et H -val jelölik és 1993-ban egymástól függetlenül fedezte fel Plavšić *et al.* [44] és Ivanciuc *et al.* [45]. A D^r reciprok-távolság mátrix nem diagonális mátrixelemeinek összegének a felével definiáljuk:

$$H = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [D^r]_{ij} \quad (12)$$

A D^r reciprok-távolság mátrix könnyen megkapható a D^r távolság mátrix $[D]_{ij}$ elemeinek a reciprokából [30]:

$$[D^r]_{ij} = 1/[D]_{ij}, \quad i \neq j \quad (13)$$

és a $[D^r]_{ii}$ diagonális mátrixelemek értéke definíció szerint nulla. A Harary-indexet is QSPR modellezésben alkalmazták [pl., 17,33,44,45].

2.9. Hiper Harary-index

A HH hiper Harary-indexet Diudea [46] vezette be és ő használta 1997-ben. Definíciója nagyon hasonlít a hiper Wiener-index definíciójára. Vegyük azt az összeget, amelyet a $[D^r]_{ij}$ reciprok távolságok és $[D^r]_{ij}^2$ négyzetük összegének a negyede alkot:

$$HH = (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \{ [D^r]_{ij} + [D^r]_{ij}^2 \} \quad (14)$$

Ez átírható mint:

$$HH = H/2 + (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [D^r]_{ij}^2 \quad (15)$$

A hiper Harary-index korlátozott alkalmazásban részesült szerkezet-tulajdonság modellezésekben [pl., 18,33].

2.10. Detour- index

A Detour-indexet, ezen a néven, Lukovits [5] használta 1996-ban. Egy évvel korábban vezette be Amić és Trinajstić [47] Wiener-szerű index néven. Az ω Detour-indexet ugyanúgy definiáljuk, mint a W Wiener-indexet, vagyis egyenlő a Δ detour-mátrix mátrixelem összegének a felével:

$$\omega = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\Delta]_{ij} \quad (16)$$

ahol $[\Delta]_{ij}$ jelöli a G gráf i és j csúcsai közötti leghosszabb út hosszát.

A G gráf Δ detour-mátrixa egy olyan $V \times V$ méretű valószínű szimmetrikus mátrix, melyre [30]:

$$[\Delta]_{ij} = \begin{cases} L(i,j) & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (17)$$

ahol $L(i,j)$ az élek maximális száma G i és j csúcsai között. Nagy rendszerre nem könnyű a detour-mátrix elkészítése, bár konstruálására számos eljárás létezik [pl., 47-49]. Lukovits is részt vett detour-mátrixok számításában. Razinggerrel [50] kifejlesztettek egy számítógépes programot Amić és Trinajstić [47] addig papíron és ceruzával használható útkövetési módszerére. A detour-index jelentős alkalmazásra talált a QSPR eljárásban [pl., 5,14,18,33,47,51,52].

2.11. Hiper detour-index

Lukovits [5,53] javasolta a hiper detour-indexet, amelynek a jele $\omega\omega$. Hasonló a definíciója, mint a WW hiper Wiener-indexnek és a HH hiper Harary-indexnek. Tehát vegyük azt az összeget, amelyet a $[\Delta]_{ij}$ nem diagonális detour-mátrix elem és $[\Delta]_{ij}^2$ négyzetük összegének a negyede alkot:

$$\omega\omega = (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \{ [\Delta]_{ij} + [\Delta]_{ij}^2 \} \quad (18)$$

Ezt az egyenletet átalakíthatjuk, mint:

$$\omega\omega = \omega/2 + (1/4) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\Delta]_{ij}^2 \quad (19)$$

Mivel a W Wiener-index és az ω detour-index aciklusos szerkezetekre megegyezik, ugyanez igaz a megfelelő hiper párjaikra is.

A hiper detour-index mérsékelt alkalmazásra lelt a szerkezeti tulajdonság modellezésben [pl., 17,18,33].

2.12. A detour-index multiplikatív változata

Analógiában a Wiener-index multiplikatív változatával, Lukovits és Trinajstić [54], elkészítette a detour-index $\pi(\omega)$ multiplikatív változatát is.

A G gráf $\pi(\omega)$ indexe megegyezik G összes csúcs párjára kapott maximális távolságok szorzatával.

$$\pi(\omega) = \prod_{i < j} (\Delta)_{ij} \quad (20)$$

Erre is javasolták $\ln\pi(\omega)$ használatát $\pi(\omega)$ helyett QSPR modellezésben. Az $\ln\pi(W)$ és $\ln\pi(\omega)$ deskriptorok természetesen megegyeznek egymással aciklusos szerkezetekben. Lukovits korai halála miatt a szerzők nem fejezték be ennek deskriptornak a kutatását.

2.13. Kirchhoff- index

A Kf Kirchhoff-indexet az ellenállás-távolság mátrix segítségével definiáljuk [55]:

$$Kf = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\Omega]_{ij} \quad (21)$$

ahol $[\Omega]_{ij}$ jelöli a G gráf i és j csúcsai között az ellenállás-távolságot. Klein és Randić [56] vezette be 1993-ban az ellenállás-távolság fogalmát abból a célból, hogy újabb lehetséges metrikákat is megvizsgáljanak. Ahogy azt a közelmúltban Palacios [58] megmutatta, ezt a definíciót már 1949-ben bevezette Foster [57] más megfontolásból.

Az Ω -val jelölt ellenállás-távolság mátrixot a következő képen definiáljuk [30]:

$$[\Omega]_{ij} = \begin{cases} r(i,j) & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (22)$$

ahol $r(i,j)$ az i és j csúcsok közötti ellenállás-távolság. 2002-ben, Lukovits részvételével Laplace-mátrixon [30,59,60] alapuló algoritmust javasoltak az ellenállás-távolság mátrix hatékony kiszámítására [19]. Az L Laplace-mátrixot a következő mátrix különbség definiálja [30]:

$$L = V - A \quad (23)$$

ahol V a fokmátrix és A a G molekuláris gráf szomszédsági mátrixa. A V fokmátrix a következő diagonális mátrix:

$$[V]_{ii} = d(i) \quad (24)$$

ahol $d(i)$ a G gráf i csúcsának a foka. Az A szomszédsági

mátrix elemei egyenlők 1-el vagy 0-val attól függően, hogy a megfelelő két csúcs szomszédos vagy nem szomszédos.

2.14. Hányados mátrixok és Wiener-összeg

A hányados mátrix fogalmát Randić [61] vezette be és később további hányados mátrix és vele kapcsolatos Wiener-összeg index került megfogalmazásra és alkalmazásra [pl., 17,61-64]. Itt csak négy WS Wiener-összeg indexet tekintünk át, mivel fejlesztésükben és alkalmazásukban részt vett Lukovits is a ciklusos és a policiklusos gráfok vizsgálatában [19], továbbá aciklusos valamint ciklusos szénhidrogének szerkezet-forráspont modellezésében [17]. Eddig még nem használták ki kellőképpen a WS indexeket szerkezet-tulajdonság modellezésben.

2.14.1. A \mathbf{D}/Δ mátrix Wiener-összeg indexe

A $\mathbf{WS}(\mathbf{D}/\Delta)$ –el jelölt Wiener-összeg indexet a molekula G gráfjának \mathbf{D}/Δ hányados mátrix diagonális elemösszegének felével definiáljuk:

$$\mathbf{WS}(\mathbf{D}/\Delta) = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{D}]_{ij} / [\Delta]_{ij} \quad (25)$$

A \mathbf{D}/Δ mátrix definíciója [30]:

$$[\mathbf{D}/\Delta]_{ij} = \begin{cases} [\mathbf{D}]_{ij} / [\Delta]_{ij} & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (26)$$

Randić [61] bevezette az RS átlagos sor-összeg indexet mint a ciklikusság mértékét. Az RS index triviálisan kapcsolatba hozható a WS indexel, mint:

$$RS = 2WS/N$$

Tehát RS csak kis mennyiségű információt ad szemben a WS -el. A $\mathbf{WS}(\mathbf{D}/\Delta)$ mennyiséget is alkalmazták egyes alkánok és cikloalkánok szerkezet-forráspont meghatározására [17].

2.14.2. A Δ/\mathbf{D} mátrix Wiener-összeg indexe

A $\mathbf{WS}(\Delta/\mathbf{D})$ Wiener-összeg indexet úgy definiáljuk, mint a G molekuláris gráf Δ/\mathbf{D} hányados mátrixának diagonális elemösszegének a felét:

$$\mathbf{WS}(\Delta/\mathbf{D}) = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\Delta]_{ij} / [\mathbf{D}]_{ij} \quad (27)$$

Az Δ/\mathbf{D} mátrixot könnyen megkaphatjuk a \mathbf{D}/Δ mátrixból egyszerűen invertálva a nem diagonális mátrixelemeket [30]:

$$[\Delta/\mathbf{D}]_{ij} = \begin{cases} [\Delta]_{ij} / [\mathbf{D}]_{ij} & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (28)$$

A $\mathbf{WS}(\Delta/\mathbf{D})$ index használhatónak bizonyult aciklusos és ciklusos szénhidrogének [16] és benzol származékok [62] szerkezet-forráspont modellezésére .

2.14.3. A \mathbf{D}/Ω mátrix Wiener-összeg indexe

Egy másik Wiener-összeg index a $\mathbf{WS}(\mathbf{D}/\Omega)$, amit a G gráf \mathbf{D}/Ω hányados mátrix diagonális elemösszegének a fele definiál [19]:

$$\mathbf{WS}(\mathbf{D}/\Omega) = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{D}]_{ij} / [\Omega]_{ij} \quad (29)$$

A \mathbf{D}/Ω mátrix definíciója [30]:

$$[\mathbf{D}/\Omega]_{ij} = \begin{cases} [\mathbf{D}]_{ij} / [\Omega]_{ij} & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (30)$$

Ezt az indexet eddig még csak ötös gyűrűt tartalmazó gráfok ciklusosságára, Platon-i testekre , C_{60} és C_{70} fullerénekre [19] alkalmazták.

2.14.4. A Ω/\mathbf{D} mátrix Wiener-összeg indexe

Az Ω/\mathbf{D} mátrix Wiener-összeg indexét $\mathbf{WS}(\Omega/\mathbf{D})$ jelöli, melyet kirchoff-összeg indexnek is neveznek és KfS-el jelölnek [19]. A következő a definíciója:

$$KfS = \mathbf{WS}(\Omega/\mathbf{D}) = (1/2) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\Omega]_{ij} / [\mathbf{D}]_{ij} \quad (31)$$

Az Ω/\mathbf{D} hányados mátrixot könnyen megkapjuk a \mathbf{D}/Ω mátrixból egyszerűen invertálva a diagonális elemeit [30]:

$$[\Omega/\mathbf{D}]_{ij} = \begin{cases} [\Omega]_{ij} / [\mathbf{D}]_{ij} & \text{if } i \neq j \\ 0 & \text{if } i = j \end{cases} \quad (32)$$

A $\mathbf{WS}(\Omega/\mathbf{D})$ indexet vagy a KfS Kirchoff-összeg indexet policiklusos gráfok négy osztályának ciklusosság mértékének meghatározására használták, mint : az öt csúcsot tartalmazó gráfok, a Platon-i testeket ábrázoló Schlegel gráfok, C_{60} és C_{70} fullerének.

3. Záró megjegyzések

Lukovits István legalább 106 közleményt publikált. Neve alatt 102 van felsorolva a *Web of Science* honlapján (2008. február 20-ai állapot). Ez a forrás nem tartalmazza négy munkáját.

Az egyiket itt elsőként hivatkozzuk, és Lukovits általánosított Wiener-index-ét ismerteti kettős kötést tartalmazó molekulákra és alkalmazásként egyes alkánok, cikloalkánok, alkének és cikloalkének partíciós együtthatóira. Lehetséges, hogy ez a cikk azért nincs felsorolva, mert a folyóirat, ahol publikálták, a *Reports in Molecular Theory* (Szerkesztő: Gábor Náray-Szabó és Harel Weinstein, CRC Press) igen rövid életű volt, csak két példányt élt meg 1990-ben. Ennek ellenére a közleményt Todeschini és Consonni tárgyalta kézikönyvében [33].

A második hiányzó munkára itt 8-ként hivatkozunk. Ebben Lukovits a Wiener-féle gráf invariánsokat ismerteti. A *Web of Science* nem tünteti fel, mivel nem tartalmaz könyveket.

A harmadik hiányzó cikket mi 28-ként hivatkozunk. Ebben Lukovits és Gutman a Wiener-szám élek szerinti felbontását adta meg. A publikálás idején MATCH még nem volt nyilvántartva a *Web of Science*-on és ezért nem szerepel a listán. Ezt a közleményt is ismertette Todeschini és Consonni kézikönyvükben [33].

A negyedik hiányzó cikk sorszáma nálunk 65. Ebben Lukovits izomerek generálásának a formuláját adja meg és az International Conference on the Role of Topology in Chemistry (Athens, GA, March 20-24, 2001) konferencián tartott előadását mutatja be.

Valószínű, hogy a már fent említett ok miatt nem tartalmazza *Web of Science* listája, ugyanis ez is könyv alakban jelent meg.

Utolsó, post mortem közölt dolgozata a 66-ös. A *Web of Science* 102 cikket tartalmazó listáján is szerepel. Ebben a szerzők szén nanocsövek aromaticitását elemezték és Lukovits István meghívott előadóként tartott azon előadását tartalmazza, amit a 21st Dubrovnik International Course and Conference MATH/CHEM/COMP 2006 (Dubrovnik, June 19-24, 2006) konferencián mutatott be.

A 106 közlemény közelítően a következő osztályokba sorolható: 26 foglalkozik molekuláris deszkriptorok fejlesztésével és számításával, 23 kémiai gráfelméleti problémákkal, 32 különféle deszkriptorok szerkezeti-tulajdonság-aktivitás modellezésével, 15 kvantumkémiai tanulmányokkal, 4 nanocsövekkel, 4 korrózió elleni védelemmel, egy tudományfilozófiával és egy kémiai információval.

Hivatkozások

- Lukovits, I. *Reports Mol. Theory* **1990**, *1*, 127.
- Lukovits, I. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1991**, *31*, 503.
- Lukovits, I. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 1079.
- Lukovits, I. *Croat. Chem. Acta* **1995**, *68*, 99.
- Lukovits, I. *Croat. Chem. Acta* **1996**, *69*, 873.
- Lukovits, I. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1998**, *38*, 125.
- Lukovits, I. *Croat. Chem. Acta* **1998**, *71*, 449.
- Lukovits, I. in: *QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors*, edited by Diudea, M.V. Nova Science Publishers, Huntington, NY, **2001**, p. 31.
- Lukovits, I. *J. Chem. Soc. Perkin* **1988**, *2*, 1667.
- Lukovits, I. *Quant. Struct.-Act. Relat.* **1990**, *9*, 227.
- Lukovits, I. *Int. J. Quantum. Chem.: Quantum Biology Symp.* **1992**, *19*, 217.
- Lukovits, I. *Comput. Chem.* **1995**, *19*, 27.
- Zhu, H.Y.; Klein D.J.; Lukovits, I. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1996**, *36*, 420.
- Diudea, M.V.; Katona, G.; Lukovits, I.; Trinajstić, N. *Croat. Chem. Acta* **1998**, *71*, 459.
- Lukovits, I.; Nikolić S.; Trinajstić, N. *Int. J. Quantum Chem.* **1999**, *71*, 217.
- Lukovits, I.; Nikolić, S.; Trinajstić, N. *Croat. Chem. Acta* **2000**, *73*, 957.
- Lučić, B.; Lukovits, I.; Nikolić S.; Trinajstić, N.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2001**, *41*, 527.
- Trinajstić, N.; Nikolić, S.; Basak, S.C.; Lukovits, I. *SAR QSAR Environ. Res.* **2001**, *12*, 31.
- Babić, D.; Klein, D.J.; Lukovits, I.; Nikolić S.; Trinajstić, N. *Int. J. Quantum Chem.* **2002**, *90*, 166.
- Trinajstić, N.; Živković, T. *Kémiai Közlemények* **1975**, *44*, 460.
- Harary, F. *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading, MA, **1971**, 2nd printing.
- Wilson, R.J. *Introduction to Graph Theory*, Oliver & Boyd: Edinburgh, **1974**, 2nd printing.
- Trinajstić, N. *Chemical Graph Theory*, CRC Press: Boca Raton, FL, **1983**; 2nd revised edition, **1992**.
- Gutman I.; Polansky, O.E. *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*, Springer: Berlin, **1986**.
- Wiener, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1947**, *69*, 17.
- Rouvray, D.H. in: *Topology in Chemistry – Discrete Mathematics of Molecules*, edited by D.H. Rouvray and R.B. King, Horwood, Chichester, **2002**, p. 1.
- Nikolić, S.; Trinajstić, N.; Mihalić, Z. *Croat. Chem. Acta* **1995**, *68*, 105.
- Lukovits, I.; Gutman, I. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **1994**, *31*, 133.
- Hosoya, H. *Bull. Chem. Soc. Japan* **1971**, *44*, 2332.
- Janežič, D.; Miličević, A.; Nikolić, S.; Trinajstić, N. *Graph-Theoretical Matrices in Chemistry*, The University of Kragujevac: Kragujevac, **2007**.
- Müller, W.R.; Szymanski, K.; von Knop, J.; Trinajstić, N. *J. Comput. Chem.* **1987**, *8*, 170.
- Devillers J.; Balaban, A.T. Editors. *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, Gordon & Breach: Amsterdam, **1999**.
- Todeschini, R.; Consonni, V. *Handbook of Molecular Descriptors*, Wiley-VCH: Weinheim, **2000**.
- Rouvray, D.H.; King, R.B. Editors, *Topology in Chemistry – Discrete Mathematics of Molecules*, Horwood: Chichester, **2002**.
- Nikolić, S.; Randić M.; Trinajstić, N. *Chem. Phys. Lett.* **2001**, *333*, 319.
- Randić, M. *Chem. Phys. Lett.* **1993**, *211*, 478.
- Lukovits, I.; Linert, W. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 899.
- Klein, D.J.; Lukovits, I.; Gutman, I. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1995**, *35*, 50.
- Gutman, I.; Linert, W.; Lukovits, I.; Dobrynin, A.A. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1997**, *37*, 349.
- Linert, W.; Renz, F.; Kleestorfer K.; Lukovits, I. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **1995**, *337*, 121.
- Linert, W.; Renz, F.; Kleestorfer, K.; Lukovits, I. *Comput. Chem.* **1995**, *19*, 395.
- Gutman, I.; Linert, W.; Lukovits, I.; Tomović, Ž. *Monat. Chem.* **2000**, *131*, 421.
- Gutman, I.; Linert, W.; Lukovits, I.; Tomović, Ž. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2000**, *40*, 113.
- Plavšić, D.; Nikolić, S.; Trinajstić, N.; Mihalić, Z. *J. Math. Chem.* **1993**, *12*, 235.
- Ivanciuc, O.; Balaban, T.-S.; Balaban, A.T. *J. Math. Chem.* **1993**, *12*, 309.
- Diudea, M. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1997**, *37*, 292.
- Amić, D.; Trinajstić, N. *Croat. Chem. Acta* **1995**, *68*, 53.
- Trinajstić, N.; Nikolić, S.; Mihalić, Z. *Int. J. Quantum Chem.* **1997**, *65*, 415.
- Trinajstić, N.; Nikolić, S.; Lučić, B.; Amić, D.; Mihalić, Z. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1997**, *37*, 631.
- Lukovits, I.; Razinger, M. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1997**, *37*, 283.
- Nikolić, S.; Trinajstić, N.; Jurić A.; Mihalić, Z. *Croat. Chem. Acta* **1996**, *69*, 1577.
- Nikolić, S.; Trinajstić, N.; Mihalić, Z. in: *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, Edited by J. Devillers and A.T. Balaban Gordon & Breach: Amsterdam, **1999**, p. 279.
- Linert, W.; Lukovits, I. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **1997**, *35*, 65.
- Lukovits, I.; Trinajstić, N. unpublished results.

55. Bonchev, D.; Balaban, A.T.; Liu, X.; Klein, D.J. *Int. J. Quantum Chem.* **1994**, *50*, 1.
56. Klein, D.J.; Randić, M. *J. Math. Chem.* **1993**, *12*, 81-95.
57. Foster, R.M. in: *Contributions to Applied Mechanics*, Reissner Anniversary Volume, Edwards Brothers, Ann Arbor, MI, **1949**, p. 333.
58. Palacios, J.L. *Methodol. Comput. Appl. Probab.* **2004**, *6*, 381.
59. Mohar, B. in: *MATH/CHEM/COMP 1988*, edited by A. Graovac, Elsevier, Amsterdam, **1989**, p. 1.
60. Trinajstić, N.; Babić, D.; Nikolić, S.; Plavšić, D.; Amić, D.; Mihalić, Z. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 368.
61. Randić, M.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1994**, *34*, 403.
62. Plavšić, D.; Trinajstić, N.; Amić, D.; Šoškić, M. *New J. Chem.* **1998**, *22*, 1075.
63. Nikolić, S.; Plavšić, D.; Trinajstić, N. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **2001**, *44*, 361.
64. Klein, D.J.; Ivanciuc, O. *J. Math. Chem.* **2002**, *30*, 271.
65. Lukovits, I. in: *Topology in Chemistry – Discrete Mathematics of Molecules*, edited by D.H. Rouvray and R.B. King, Horwood: Chichester, **2002**, p.333.
66. Lukovits, I. ; Kármán, F.H.; Nagy, P.M.; Kálmán, E. *Croat. Chem. Acta* **2007**, *80*, 233.

Distance-Related Molecular Descriptors

A brief review of various molecular descriptors based on graph-theoretical distances is presented with a special emphasis on those

distance-descriptors in whose development István Lukovits has been involved.