

TOPOLOGÍA MOLECULAR

J.M. AMIGÓ*, A. FALCÓ**, J. GÁLVEZ† Y V. VILLAR‡

*Centro de Investigación Operativa, Universidad Miguel Hernández de Elche

**Dpto. de Ciencias Físicas, Matemáticas y de la Computación, Universidad CEU
Cardenal Herrera

†Dpto. de Química Física, Universitat de Valencia

‡Dpto. de Fisiología, Farmacología y Toxicología, Universidad CEU Cardenal Herrera

jm.amigo@umh.es, afalco@uch.ceu.es, jorge.galvez@uv.es,
vicente.villar@uv.es

Resumen

Este artículo pretende dar una vista panorámica de la topología molecular, que es una aplicación de la teoría de grafos muy utilizada en la industria química y, sobre todo, en la farmacéutica, pero poco conocida por la comunidad matemática. El objetivo de la topología molecular es la caracterización estructural de moléculas mediante unos invariantes sencillos, llamados índices topológicos. Estos índices, una vez procesados estadísticamente, juegan un papel decisivo en el descubrimiento de nuevas aplicaciones de moléculas conocidas y en el diseño de moléculas con propiedades químicas y farmacológicas específicas. En el apartado de aplicaciones nos limitamos, por su importancia, a las farmacológicas.

Palabras clave: *Topología molecular, Teoría de grafos, Análisis discriminante*

Clasificación por materias AMS: *92E10*

1 Introducción

La “irrazonable eficacia de las matemáticas en las ciencias naturales” es una característica de la historia de la ciencia y de la técnica modernas que no ha hecho sino acentuarse aún más, si cabe, desde que el físico matemático Eugene Wigner (1902-1995), introductor de la teoría de grupos en la física atómica, titulara así su famoso artículo [22]. No hace falta decir que la sorpresa de Wigner (y de tantos otros científicos y pensadores) se debe al hecho de que las matemáticas, “la más pura de las ciencias”, es una creación del intelecto que, en principio, no busca aplicación alguna. Nuestro objetivo en este artículo es, precisamente, ilustrar esta eficacia con una aplicación de la teoría de grafos a las ciencias de la salud y, más concretamente, al descubrimiento de nuevos fármacos y al diseño de moléculas para aplicaciones terapéuticas específicas.

Fecha de recepción: 18/05/2007