CAYLEY au pays des alcanes

1821 – 1895
"On the mathematical theory of isomers" 1874
= application des graphes à la chimie !

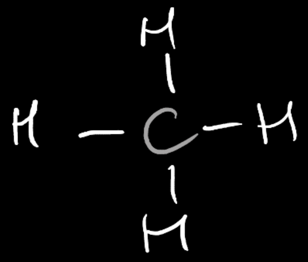
Alcanes = Hydrocarbures saturés

Hydrogène + Carbone

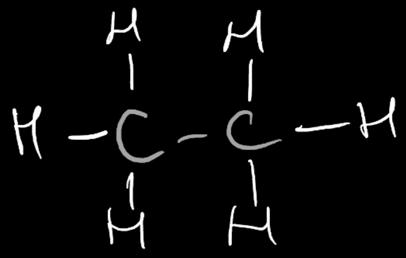
H valence : 1

C valence : 4

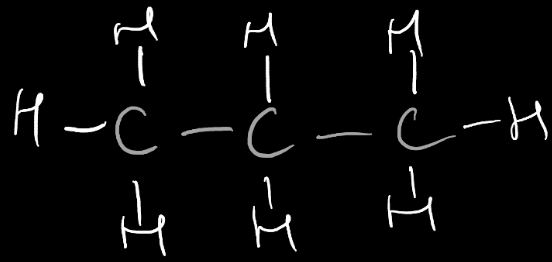
uniquement des liaisons simples et pas de cycles pour maximiser le nombre d'atomes



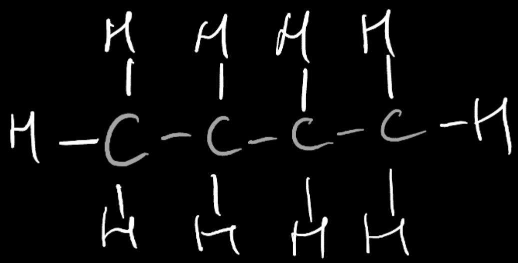
CH_4 méthane



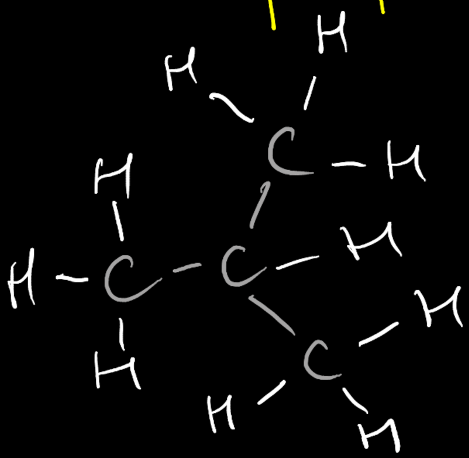
C_2H_6 éthane



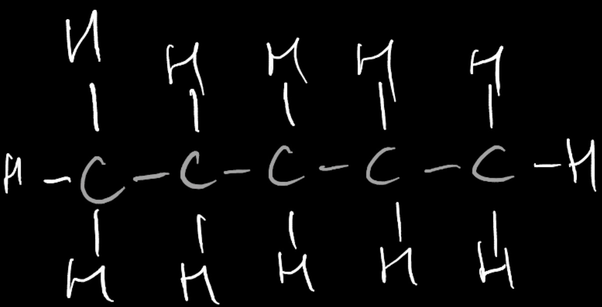
C_3H_8 propane



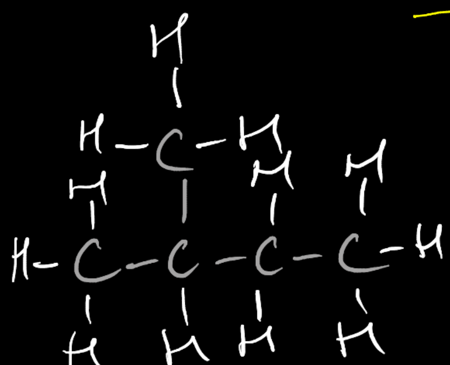
ou



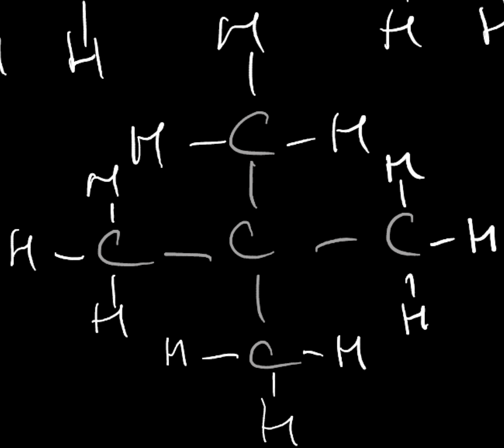
C_4H_{10} butane



ou



ou



C_5H_{12} pentane

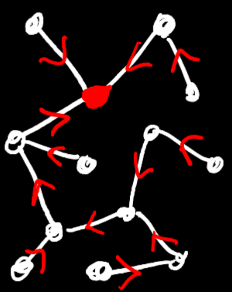
etc...

hexane C_6H_{14} : 5 isomères
heptane C_7H_{16} : 9 isomères
octane C_8H_{18} : 18 isomères

Vus comme des graphes les alcanes sont des arbres (= connexes et acycliques) dont les sommets sont de degré 1 (H) ou de degré 4 (C).

<u>Théorème</u> Un arbre de n sommets possède $n-1$ arêtes.

<u>Preuve</u> Soit x un sommet arbitraire de l'arbre.



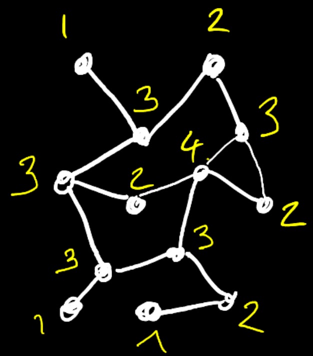
Pour tout sommet $y \neq x$, il existe un chemin reliant y à x (connexe) et ce chemin est unique (acyclique).

Chaque arête peut donc être orientée vers x.

À part x, les $n-1$ sommets restant ont tous exactement une arête sortante.

Théorème Dans un graphe (pas forcément un arbre) la somme des degrés de chaque sommet est le double du nombre d'arêtes.

Preuve chaque arête participe au degré de ses deux extrémités



$\sum \deg(x) = 30$

La formule des alcanes :

soit c le nombre d'atomes de carbone
h ——— d'hydrogènes

On sait que

- l'arbre possède $c+h$ sommets, donc $c+h-1$ arêtes.
- par ailleurs à cause des valences du carbone (4) et de l'hydrogène (1) le nombre d'arêtes est $(4c+h)/2$

$$c+h-1 = (4c+h)/2$$
$$\Leftrightarrow 2c+2h-2 = 4c+h$$
$$\Leftrightarrow h = 2c+2$$

On a montré que les alcanes ont pour formule C_nH_{2n+2}

Quid du nombre d'isomères ?

n	$Ni(n)$
1	1
2	1
3	1
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18
9	35
10	75
...	
50	1,117,743,651,746,953,270

oeis.org/A000602

Une procédure récursive pour calculer $Ni(n)$ est connue depuis 1932