ნუნუ ცეცაძე

მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციები საქართველოში

წარმოდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის

მოსაპოვებლად

სადოქტორო პროგრამა - ქიმია

შიფრი - 0503

ა ვ ტ ო რ ე ფ ე რ ა ტ ი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

თბილისი, 0175, საქართველო

2021

საავტორო უფლება ©2021 წელი, ნუნუ ცეცაძე

სამუშაო შესრულებულია საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის

ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის

ქიმიის დეპარტამენტი

სამეცნიერო ხელმძღვანელი: პროფესორი თენგიზ წივწივაძე

რეცენზიები: _____

_____

დაცვა შედგება _____ წლის "____" _____, _____ საათზე
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და
მეტალურგიის ფაკულტეტის სადისერტაციო საბჭოს კოლეგიის სხდომაზე,
კორპუსი _____, აუდიტორია _____
მისამართი: 0175, თბილისი, კოსტავას 69.

დისერტაციის გაცნობა შეიძლება საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის
ბიბლიოთეკაში, ხოლო ავტორეფერატის - ფაკულტეტის ვებ-გვერდზე.

სადისერტაციო საბჭოს მდივანი

სამუშაოს ზოგადი დახასიათება

საკვლევი თემის აქტუალობა: ცნობილია, რომ მეცნიერების განვითარების ისტორია სავსეა პარადოქსებით. ცნება "მათემატიკური (ალგებრული) ქიმია" ჯერ კიდევ რამდენიმე ათეული წლის წინათ ქიმიკოსთა უმრავლესობისათვის სიტყვათა გაუგებარ კომბინაციას წარმოადგენდა. არადა, ეს ტერმინი პირველად (ცხადია, სულ სხვა გაგებით), გამოიყენა (1741 წ.) მიხეილ ლომონოსოვმა თავის სახელმძღვანელოში - "მათემატიკური ქიმიის ელემენტები".

თანამედროვე განმარტებით, მათემატიკური ქიმია - არის ინფორმაციის მრავალგანზომილებიანი მატრიცა ნივთიერებათა აღნაგობის საფუძვლების შესახებ. მათემატიკური ქიმია ნივთიერებათა მოლეკულებსა და მათ გარდაქმნებს შეისწავლის უმაღლესი მათემატიკის გამოყენებით. მისი უმნიშვნელოვანესი ამოცანებია: კავშირის გამოვლენა - შესწავლა ნივთიერებათა მოლეკულების აღნაგობასა და მათ თვისებებს შორის, ქიმიური რეაქციების კვლევა - დახასიათება, ჯერ კიდევ უცნობი რეაქციების პროგნოზირება და სხვ. თითქმის ყოველთვის მათემატიკური ქიმიის პრობლემების გადაჭრისას გამოიყენება კომპიუტერი, რადგან მხოლოდ მისი საშუალებით ხერხდება ურთულესი გამოთვლების ჩატარება. ამიტომაც არის, რომ მათემატიკური ქიმიის ამ მიმართულებას, ხშირად, კომპიუტერულ ქიმიას უწოდებენ.

დარწმუნებით შეიძლება ითქვას, რომ მათემატიკური ქიმია XXI საუკუნის ქიმიაა.

- ფიზიკის მათემატიზაცია XX საუკუნის შუა წლებში პრაქტიკულად დასრულდა;

- ქიმიის მათემატიზაცია დასრულებამდე, ჩვენი აზრით, შორს არაა;

- ბიოლოგიის მათემატიზაცია ამჟამად მიმდინარეობს.

მათემატიკური ქიმიის სტრატეგიული მიზანია თანამედროვე მათემატიკის უმძლავრესი აპარატის (ჯგუფთა თეორია, გრაფების თეორია, ინფორმაციის თეორია და სხვ.) გამოყენება ქიმიის ურთულესი საკითხების გადასაწყვეტად, რომელთა შორის ძირითადია:

1. ტოპოლოგიური ინდექსების (მოლეკულური დესკრიპტორების) გამოყენებით "აღნაგობა-თვისებების" ტიპის კორელაციური განტოლებების აგება და შესწავლა.

2. ბრუტო-ფორმულის მიხედვით ქიმიურ ნაერთთა შესაბამისი იზომერების რიცხვის განსაზღვრა და კომპიუტერული გენერაცია (ე.წ. "ჩამოთვლა"); იზომერების კლასიფიკაცია.

3. სხვადასხვა კლასის რეაქციის მათემატიკურ-ქიმიური სპეციფიკის გამოკვლევა ("სირთულის" ცვლილება, ინფორმატიულობის ცვლილება და სხვ.).

4. ახალი (უცნობი) რეაქციების კომპიუტერული ძიება.

5. ქიმიურ ნაერთთა სინთეზის ოპტიმალური გზების კომპიუტერული დაგეგმვა და სხვ.

სამუშაოს მიზანი: ნაშრომის მიზანია მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციების კვლევა საქართველოში. ჩვენება იმისა, თუ ვინ იდგა მათემატიკური ქიმიის საწყისებთან ჩვენს ქვეყანაში, რა მდგომარეობაა დღეს მათემატიკური ქიმიის განვითარების დონით და პასუხობს თუ არა ჩატარებული სამეცნიერო კვლევები, მიღწეული შედეგები და პუბლიკაციები საერთაშორისო სტანდარტებს.

მათემატიკური ქიმიით ქართველ მეცნიერთა დაინტერესება გასულ საუკუნეში დაიწყო და საქართველოში ქიმიის განვითარების საერთო ისტორია, რომლის შექმნაც უახლოესი მომავლის საქმეა, ვერ იქნება სრულყოფილი მათემატიკური ქიმიის განვითარების ისტორიის გათვალისწინების გარეშე, რამეთუ ქართველ მეცნიერ-მკვლევართა (პროფ. მიხეილ გვერდწითელი და მისი მოწაფეები, პროფესორები გია გამზიანი, გიორგი ლეკიშვილი) მიერ მართლაც, რომ ღირსეული და მნიშვნელოვანი ნაბიჯები გადაიდგა მაღალი დონის მეცნიერული მათემატიკური ქიმიის დასამკვიდრებლად საქართველოში. ამდენად უაღრესად მნიშვნელოვანი და აქტუალურია მეცნიერების ერთ-ერთი უაღრესად პერსპექტიული დარგის, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციების გამოკვლევა ჩვენს სინამდვილეში სწორედ მაშინ, როდესაც

დღის წესრიგში დგას ჩვენი წარსულის ახლებური, სიღრმისეული და, რაც მთავარია, ობიექტური მეცნიერული კვლევების ჩატარების აუცილებლობა.

ნაშრომის მეცნიერული სიახლე: პირველად ჩატარდა სწორხაზოვანი (ნორმალური) ალკანების , ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის, ბის-(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულების ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ; ასევე პირველად განხორციელდა ტეტრაამინოპლატინა (II)-ის დიჰალოგენირების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში ; ასევე პირველად განხორციელდა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების და პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა; პირველად ჩატარდა მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში .

თითოეული ამ კვლევის შედეგად პირველად დაფიქსირდა ნაერთის იონიზაციის პირველი პოტენციალი ზოგიერთი ნორმალური ალკანისათვის ექსტრაპოლაციის გზით; ასევე, პირველად განისაზღვრა ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლისთვის ლღობის ტემპერატურა და მოლეკულური რეფრაქცია; პირველად გამოკვლეულია ზოგიერთი ბის-(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულებისთვის ლღობის ტემპერატურა; პირველად დადგინდა ზოგიერთი ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენიდებისთვის დაშლის ტემპერატურა; პირველად იქნა გამოთვლილი ზოგიერთი წრფივად კონდენსირებული არომატული ნახშირწყალბადისთვის დიამაგნიტური ამთვისებლობა და ბმების π - ელექტრონული ენერგია ; ასევე , პირველად იქნა გამოთვლილი პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგებისთვის იონიზაციის პირველი პოტენციალი; პირველად იქნა შემჩნეული, რომ მეთანის ჰალოგენირების რეაქციების დროს პროცესი მიმდინარეობს სისტემის ინფორმატიულობის ზრდით.

პირველად იქნა დამტკიცებული თეორემა იმის შესახებ, რომ გრაფი ,,ვარსკვლავის“ ფსევდოთანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტი ნულის

ტოლია.

ნაშრომის თეორიული და პრაქტიკული ღირებულება: ჩვენს კვლევაში ნაჩვენებია ორგანული ნაერთების მოლეკულათა მათემატიკური ჩაწერის მეთოდი რნბ–მატრიცების სახით. დადგენილია, რომ რნბ–მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობა წარმოადგენს ახალ ტოპოლოგიურ ინდექსს ,,აღნაგობა–თვისება" კორელაციის გამოსავლენად ალკანების, თიოლების, ჰალოგენალკანების და წრფივად კონდენსირებული არომატული ნახშირწყალბადების ჰომოლოგიურ რიგში.

ასევე ნაჩვენებია, რომ ეპ–მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობა წარმოადგენს ახალ ტოპოლოგიურ ინდექს ,, აღნაგობა–თვისება" კორელაციის გამოსავლენად ალკანების ჰომოლოგიურ რიგში.

გრძელდება რნბ– და ქვაზი–(რნბ) მატრიცთა მეთოდების გამოყენებით ზოგიერთი კლასის არაორგანული ნაერთის შესწავლა (ჰალოგენწყალბადები, ტუტე ლითონთა ჰალოგენიდები და სხვ.).

შემუშავებულია კომპლექსური ნაერთების ალგებრულ–ქიმიურად აღწერის მოდელები, რომელთათვისაც მოწოდებულია შესაბამისი რეაქციების ტოპოლოგიური ინდექსები.

მიღებული შედეგების საფუძველზე შესაძლებელია კორელაციების ,, აღნაგობა–თვისებები" გამოვლენა–შესწავლა ორგანულ, არაორგანულ და კომპლექსნაერთთა სხვადასხვა კლასისათვის. კონსტრუირებული ტოპოლოგიური ინდექსების საშუალებით შესაძლებელია ნაერთთა გარდაქმნების კინეტიკური მახასიათებლების ალგებრულ–ქიმიურ ასპექტში დახასიათება. კორელაციური განტოლებები საშუალებას იძლევა ჩატარდეს მოლეკულათა მახასიათებელი ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრების ინტერპოლაცია და ექსტრაპოლაცია ქიმიურ ნაერთთა სხვადასხვა კლასში (ისეთი წევრისათვის, რომლისათვისაც ამ პარამეტრების ექსპერიმენტული მნიშვნელობა უცნობია).

კვლევაში გამოყენებული მეთოდები: მათემატიკური ქიმიის ქართული სკოლის მიერ შემუშავებულია რამდენიმე ახალი ტოპოლოგიური ინდექსი,

რომელთა შორის ყველაზე ეფექტური და უმნიშვნელოვანესია ოთხი ტოპოლოგოური ინდექსი.

პროფ. მ. გვერდწითელის მიერ შემუშავებული ოთხი ეფექტური ტოპოლოგიური ინდექსი აგებულია რნბ-, ქვაზი-რნბ-, ფსევდო-რნბ- და ეპ-მატრიცების ბაზაზე - სადაც ისინი წარმოადგენენ ამ მატრიცების დეტერმინანტთა მნიშვნელობების ათობით ლოგარითმებს, რომელთა საშუალებით იგება კორელაციური განტოლებები.

ნაშრომის აპრობირება: დისერტაციის ძირითადი შინაარსი მოხსენიებული იყო საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის სამ სემინარზე და ორ საერთშორისო კონფერენციაზე.

პუბლიკაციები: სადისერტაციო ნაშრომის შედეგები წარმოდგენილი იყო ორგანული ქიმიის ორ საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციაზე მასალათა კრებულში ,,Advances in organic Heterocyclic Chemistry” და 13 ადგილობრივ ჟურნალში (,,საქართველოს ქიმიური ჟურნალი“, ,,საქართველოს საინჟინრო სიახლენი“, საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ,,მაცნე“ და სხვ.) .

სამუშაოს მოცულობა: დისერტაციის სრული მოცულობა შეადგენს 122 ნაბეჭდ გვერდს. ნაშრომი შეიცავს რეზიუმეს (ორ ენაზე), შინაარს, შესავალს , ცხრილებს, დიაგრამებს, სქემებს, 2 თავს და 195 გამოყენებულ ლიტერატურას.

სამუშაოს ძირითადი შინაარსი

პირველ თავში წარმოდგენილია საკვალიფიკაციო საკვლევი თემის გარშემო არსებული ინფორმაციის კრიტიკული განხილვა, აღწერილია ნივთიერებებათა სხვადასხვა თვისება, რომელთა მიხედვით ჩამოყალიბებულია კვლევის ძირითადი მიზანი, მის მისაღწევად გადასაჭრელი ამოცანები და კვლევის განხორციელების საშუალებები.

1. 1. იზომერების გენერაცია და კლასიფიკაცია

ტერმინი ,,იზომერი “ პირველად 1830 წელს გამოიყენა იაკობ ბერცელიუსმა ისეთი ნაერთების აღსანიშნავად, რომელთაც გააჩნიათ ერთნაირი ქიმიური შედგენილობა და მოლეკულური მასა, მაგრამ იჩენენ განსხვავებულ თვისებებს.

ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში წარმოდგენილია იზომერების კლასიფიკაცია მათში პირველადი - A (CH_3-), მეორეული - B (-CH_2-), მესამეული - C ($-\overset{|}{C}H$) და მეოთხეული - D ($-\overset{|}{C}-$) ნახშირბადატომების რიცხვის მიხედვით. ამ მიდგომის საფუძველზე ნებისმიერი ალკანის მოლეკულა მათემატიკურად შეიძლება ჩაიწეროს როგორც:

$$A_a B_b C_c D_d \qquad 1$$

სადაც a, b, c და d – A, B, C და D ჯგუფების რიცხვებია. ცხადია,

$$a + b + c + d = n \qquad 2$$

$$3a + 2b + c = 2n+2 \qquad 3$$

(2) გამოსახულებას <u>ოჯახი</u> ეწოდება.

ცხრილი 1-ში მოყვანილია იზომერების, ოჯახების და ზეოჯახების რიცხვი C_3H_8-დან $C_{10}H_{22}$-მდე.

ცხრილი 1. იზომერების, ოჯახების და ზეოჯახების რიცხვი C_3H_8-დან $C_{10}H_{22}$- მდე

C_nH_{2n+2}	C_3H_8	C_4H_{10}	C_5H_{12}	C_6H_{14}	C_7H_{16}	C_8H_{18}	C_9H_{20}	$C_{10}H_{22}$
იზომერების რიცხვი	1	2	3	5	9	18	35	75
ოჯახების რიცხვი	1	2	3	4	5	7	8	10
ზეოჯახების რიცხვი	1	2	3	4	4	6	6	6

(2) და (3) ფორმულების გამოყენებით შესაძლებელია ოჯახების ჯამური რიცხვის განსაზღვრა. ამავე დროს არსებობს მეთოდი, რომელიც საშუალებას იძლევა განვსაზღვროთ როგორც ოჯახების ჯამური რიცხვი, ასევე ტიპებიც. ამ მეთოდის არსი მდგომარეობს (2n+2) წყალბადატომის

განაწილების ყველა ვარიანტის ჩამოთვლაში n -ნახშირბადატომზე. ასე, მაგალითად, ჰეპტანისთვის -C_7H_{16} იქნება:

C	1	2	3	4	5	6	7	
H	3	3	3	3	3	1	0	A_5CD
	3	3	3	3	2	2	0	A_4B_2D
	3	3	3	3	2	1	1	A_4BC_2
	3	3	3	2	2	2	1	A_3B_3C
	3	3	2	2	2	2	2	A_2B_5

4

ცხრილი 2-ში მოყვანილია ოჯახების ტიპი C_3H_8 -დან C_8H_{18}- მდე. ფრჩხილებში მოცემულია იზომერების ის რიცხვი, რომელთაც მოცემული ოჯახი შეიცავს.

ცხრილი 2. ოჯახთა ტიპები C_3H_8 -დან C_8H_{18}-მდე

C_3H_8	C_4H_{10}	C_5H_{12}	C_6H_{14}	C_7H_{16}	C_8H_{18}
A_2B (1)	A_2B_2 (1) A_3C (1)	A_2B_3 (1) A_3BC (1) A_4D (1)	A_2B_4 (1) A_3B_2C (2) A_4BD (1) A_4C_2 (1)	A_2B_5 (1) A_3B_3C (3) A_4B_2D (2) A_4BC_2 (2) A_5CD (1)	A_2B_6 (1) A_3B_4C (4) A_4B_3D (3) $A_4B_2C_2$ (5) A_5BCD (3) A_5C_3 (1) A_6D_2 (1)

აღმოჩნდა, რომ ოჯახების გაერთიანება შესაძლებელია უფრო ტევად და შემოსაზღვრულ სიმრავლეებად - ზეოჯახებად. სულ არსებობს 7 ზეოჯახი:

AB, AC, AD, ABC, ABD, ACD და ABCD. (ინდივიდუალურ ზეოჯახს წარმოქმნის C_2H_6 (A-ტიპის) და CH_4).

1.2. ტოპოლოგიური ინდექსების შემუშავება და მათ ბაზაზე კორელაციური განტოლებების ,,აღნაგობა-თვისებები“ კონსტრუირება და გამოკვლევა

დღესდღეობით პრობლემის - ,,სტრუქტურა-თვისება“ - გადასაჭრელად ხშირად მიმართავენ შედარებით მარტივი, ფორმალური ხასიათის მეთოდების შემუშავებას, რომელთაც საფუძვლად უდევს მოლეკულების აღნაგობის ალგებრულად გამოსახვა. მოლეკულების სტრუქტურისადმი ასეთი ე.წ. ტოპოლოგიური მიდგომის განხორციელებისას, მხედველობაში

მიიღება მხოლოდ ატომთა ტიპები და მათ შორის არსებული ბმის ჯერადობა. რაც შეეხება მოლეკულის მეტრიკულ მახასიათებლებს - ბმის სიგრძეს, ბმებს შორის კუთხეებს და სხვა - ისინი უგულებელყოფილნი არიან.

ამჟამად, ტოპოლოგიური მიდგომის შემდგომი განვითარება უმთავრესად გრაფებისა და მატრიცების თეორიის აქტიურ გამოყენებასთანაა დაკავშირებული, კერძოდ, დიდი მნიშვნელობა ენიჭებათ ე.წ. აწონილი ქიმიური გრაფების (გრაფის წვეროებსა და წიბოებს ენიჭებათ რიცხობრივი მნიშვნელობები - წონები, რაც, თავის მხრივ, ატომთა ვალენტობას, ქიმიური ბმის ჯერადობას და სხვა მახასიათებლებს გულისხმობს) - შესაბამისად, ისეთი მათემატიკური კონსტრუქციების შემუშავებას, რომლებიც რიცხობრივად დაახასიათებენ მათ აღნაგობას და არ იქნებიან დამოკიდებულნი (ინვარიანტულები იქნებიან) წვეროებისა და წიბოების ნუმერაციაზე. ასეთ რიცხვებს ტოპოლოგიურ ინდექსებს (მოლეკულურ დესკრიპტორებს) უწოდებენ. ტოპოლოგიურ ინდექსებსა T_1, T_2, … . T_N და რომელიმე ფიზიკურ-ქიმიური თვისების რიცხობრივ მახასიათებელს - P შორის (მრავალფაქტორიანი ანალიზის მეთოდზე აგებული) შემდეგი ფუნქციური დამოკიდებულება არსებობს:

$$P = k_0 + k_1 T_1 + k_2 T_2 + \ldots + k_N T_N \qquad 5$$

სადაც ki - გარკვეული კოეფიციენტებია.

რნბ-მატრიცის (აბრევიატურა ,,რნბ“ ნიშნავს <u>რ</u>იგობრივი <u>ნ</u>ომერი - <u>ბ</u>მა) დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია - ქიმიურ ბმათა ჯერადობები. ზოგადად, სამატომიანი ABC მოლეკულის შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{Vmatrix} Z_A & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB} & Z_B & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC} & \Delta_{BC} & Z_C \end{Vmatrix} \qquad 6$$

სადაც: Z_A, Z_B და Z_C, შესაბამისად , A , B და C ქიმიური ელემენტების რიგობრივი ნომრებია; Δ_{AB}, Δ_{BC} და Δ_{AC} - ქიმიურ ბმათა ჯერადობები A და B, B

და C, A და C ატომებს შორის. (6) მატრიცის დეტერმინანტთა მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი - $lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს.

რნბ-მატრიცის რანგი მის შესაბამის მოლეკულაში შემავალ ატომთა რიცხვის ტოლია, ამიტომაც გამოთვლები (მატრიცის შესაბამისი დეტერმინანტის გამოთვლა), შედარებით დიდი მოლეკულებისათვის საკმაოდ შრომატევადია.

ამ მიზეზით მოხდა რნბ-მატრიცის მოდერნიზაცია ქვაზი-რნბ-მატრიცად (რ$\widetilde{\text{ნ}}$ბ) . ეს უკანასკნელი საშუალებას იძლევა არა მარტო ადეკვატურად აისახოს კონკრეტული მოლეკულის სტრუქტურის სპეციფიკა, არამედ გამოთვლების შრომატევადობაც მნიშვნელოვნად შემცირდეს. ისიც უნდა აღინიშნოს, რომ ეს მიდგომა საშუალებას იძლევა მოლეკულა წარმოვაჩინოთ როგორც ძირითადი სტრუქტურული ფრაგმენტის („ჩონჩხის“), ჩამნაცვლებელისა და სარეაქციო ცენტრისაგან შემდგარი სისტემა, რაც ტრადიციული მიდგომაა ორგანულ ქიმიაში. ამგვარად, ფორმალურად, ქვაზი-რნბ-მატრიცას (6) სახე აქვს, ოღონდ ამ შემთხვევაში A, B და C წარმოადგენენ არა ინდივიდუალურ ქიმიურ ელემენტებს, არამედ მოლეკულის სტრუქტურულ ფრაგმენტებს. შესაბამისად, Z_A, Z_B და Z_C სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამებია:

$$Z_A = \sum Z_a$$
$$Z_B = \sum Z_b \qquad 7$$
$$Z_C = \sum Z_c$$

ასე, მაგალითად, ალანინის NH_2-CH_2-COOH შესაბამისი რნბ-მატრიცა მეათე რანგისაა. თუ განვიხილავთ მოდელს:

$$A - B - D \qquad 8$$

სადა: A≡NH_2, B≡CH_2, D≡COOH, შესაბამისი ქვაზი-რნბ-მატრიცის რანგი სამის ტოლი ხდება. (8) მოდელი ლოგიკურია ქიმიური თვალსაზრისითაც - ამინოძმარმჟავა ამინო-ჯგუფის (-NH_2), (-CH_2-) ფრაგმენტისა და კარბოქსილის ჯგუფის (-COOH) „ქიმიური“ ერთიანობაა.

იმ შემთხვევაში, როდესაც მოლეკულის სტრუქტურის დახასიათებისას მიზანშეწონილია რომელიმე ატომის (ან - ატომების) იზოლირებულად

განხილვა, გამოიყენება ფსევდო-რნბ-მატრიცები ($\overline{\text{რნბ}}$), რომლის დიაგონალური ელემენტებია როგორც ცალკეული ატომების რიგობრივი ნომრები, ასევე სხვადასხვა სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ელემენტების რიგობრივი ნომრების ჯამი.

მაგალითად, ქლორძმარმჟავა $Cl\text{-}CH_2\text{-}COOH$ შეიძლება წარმოდგენილი იყოს შემდეგი მოდელით:

$$A - B - D \qquad 9$$

სადაც: $A \equiv Cl$, $B \equiv CH_2$, $D \equiv COOH$.

ეპ-მატრიცის (აბრევიატურა ნიშნავს: ელექტროუარყოფითობა - პოლარობა) დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ელექტროუარყოფითობები, არადიაგონალური - შესაბამის ბმათა პოლარობა. სამატომიანი ABC მოლეკულისთვის ეპ - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{Vmatrix} \chi_A & \mu_{AB} & \mu_{AC} \\ \mu_{AB} & \chi_B & \mu_{BC} \\ \mu_{AC} & \mu_{BC} & \chi_A \end{Vmatrix} \qquad 10$$

სადაც χ_A, χ_B , χ_C – A, B და C ქიმიური ელემენტების ელექტროუარყოფითობებია; μ_{AB} , μ_{AC} , μ_{BC} - შესაბამისად, A-B , A-C და B-C ქიმიური ბმების პოლარულობა. მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი - $\lg(\Delta_{ეპ})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს.

ABn ტიპის მოლეკულებისათვის (სადაც A - n-ვალენტოვანი ქიმიური ელემენტია, B - ერთვალენტოვანი) შემუშავებულია რნბ-მატრიცის ახალი მოდიფიცირებული სახეობა ჯანმ-მატრიცა (ჯგუფური ანბ-მატრიცა). იგი მეორე რანგისაა, მისი პირველი დიაგონალური ელემენტია Z_A, მეორე nZ_B (ამგვარად, n რაოდენობა ერთვალენტოვანი B ატომი განიხილება როგორც ერთი ფსევდო-ატომი); არადიაგონალური ელემენტებია n (ამგვარად, n რაოდენობა ერთმაგი ბმა განიხილება როგორც n-ჯერადი ფსევდო-ბმა). ჯანბ-მატრიცის სახეა:

$$\begin{Vmatrix} Z_A & n \\ n & nZ_B \end{Vmatrix}$$

ამგვარად, იგება კორელაციური განტოლებები:

$$P = \alpha_1 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + b_1 \qquad 11$$

$$P = \alpha_2 \lg(\Delta_{(\text{რნბ})\cdot}) + b_2 \qquad 12$$

$$P = \alpha_3 \lg(\Delta_{(\overline{\text{რნბ}})}) + b_3 \qquad 13$$

$$P = \alpha_4 \lg(\Delta_{\text{ეკ}}) + b_4 \qquad 14$$

$$P = \alpha_5 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + b_5 \qquad 15$$

სადაც : P - მოლეკულის ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრია ($T_{\text{ლღ}}$, $T_{\text{დუღ}}$, d_4^{20}, n_D^{20}, ΔG, ΔH, ΔS და სხვ); α_1, α_2, α_3, α_4, α_5, b_1, b_2, b_3, b_4 , b_5 რიცხვებია. (11) – (15) განტოლების კონსტრუირება ხდება კომპიუტერზე , უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით. მათი სიზუსტე ხასიათდება ე.წ. r კორელაციის კოეფიციენტით:

$$r = \sqrt{\frac{(\sum XY)^2}{\sum X^2 \cdot \sum Y^2}}$$

ჯაფემ შემოიტანა კორელაციის სიზუსტის კრიტერიუმები:

$r = 1$ იდეალური კორელაცია

$r > 0{,}99$ ბრწყინვალე კორელაცია

$0{,}99 > r > 0{,}95$ დამაკმაყოფილებელი კორელაცია

$0{,}95 > r > 0{,}90$ მიახლოებითი კორელაცია.

(11) – (15) განტოლებები საშუალებას იძლევა ჩატარდეს მოლეკულათა მახასიათებელი ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრების ინტერპოლაცია და ექსტრაპოლაცია ქიმიურ ნაერთთა სხვადასხვა კლასში (ისეთი წევრებისათვის, რომლისათვისაც ამ პარამეტრების ექსპერიმენტული მნიშვნელობა უცნობია). გადავიდეთ კონკრეტული სისტემების განხილვაზე.

1.3. ქიმიური რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

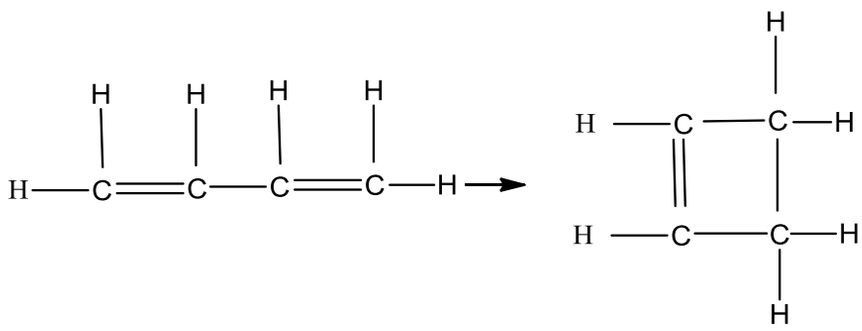
პირველი ცდა ქიმიური რეაქციების ფორმალური მათემატიკური გამოკვლევისა ჩატარდა XX საუკუნის დასაწყისში ვ. ვასილევის მიერ, ქიმიური ინვარიანტების თეორიის გამოყენებით. ეს მიდგომა ინტენსიურად

ვითარდება ბოლო სამ ათწლეულში. ქიმიური პროცესების აღწერის სხვადასხვა კონცეფციებიდან აღსანიშნავია: ბალაბანის, ლალას, ჰენდრიქსონის, უგის და დუგუჯის, ზეფიროვისა და ტრაჩის და სხვა კონცეფციები.

ქართველი მკვლევარების მიერ შემუშავებულია რეაქციების აღწერის მათემატიკურ-ქიმიური მეთოდი რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცების საშუალებით . პარალელურად გამოიყენება შენონის ინფორმაციის ენტროპიის მოდერნიზებული მოდელი. განვიხილოთ რეაქციათა ზოგიერთი მნიშვნელოვანი კლასი.

ელექტროციკლური რეაქციების ალგებრული დახასიათება რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში .

ელექტროციკლური რეაქციები განვიხილოთ დივინილის ციკლობუტენად ელექტროციკლიზაციის მაგალითზე:



16

ამ პროცესის მატრიცული ჩანაწერია:

$$\begin{Vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \rightarrow \begin{Vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 6 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 6 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \qquad 17$$

აღმოჩნდა, რომ ამ პროცესს თან ახლავს რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ზრდა:

$$\Delta_r = 32 > 0 \qquad 18$$

ანალოგიური შედეგებია მიღებული ელექტროციკლური რეაქციების სხვა შემთხვევების შესწავლისას. ამგვარად , ელექტროციკლურ რეაქციებს ახლავს სისტემის სირთულის ზრდა.

1.4. ორგანული რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის ალგებრული შეფასება

კონსტრუირებულ იქნა ქიმიური რეაქციების მიმდინარეობის სტრუქტურული სირთულის ალგებრული მოდელი. იგი ბმების გადანაწილების ოთხ, ახალ ლოკალურ მახასიათებელს აერთიანებს. ესენია:

1. ცალკეულ ბმათა ჯერადობის ცვლილების სირთულის ინდექსი - χ ;
2. სპეციფიუკური სარეაქციო ცენტრის ფორმალური ელექტრონული კონფიგურაციის ცვლილების სირთულის ინდექსი - χ^0;
3. ჩვეულებრივი სარეაქციო ცენტრის სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსი - CI ;
4. სპეციფიკური სარეაქციო ცენტრის სტრუტურული ქცევის სირთულის ინდექსი -CI^0.

1.5. გეომეტრიული და ოპტიკური იზომერების აღწერა (3D ინდექსები)

ცნობილია, რომ გრაფების თეორიის შეზღუდულობა სტერეოსტრუქტურის მოდელირებისას გაპირობებულია მისი ინჰერენტული შეზღუდულობით. ეს გამოწვეულია წვეროთა შორის მხოლოდ ერთი მიმართების – თანაზიარობის (ქიმიური თვალსაზრისით – ბმულობის) განხილვაში მაშინ, როდესაც მოლეკულის თვისებებს აპირობებს არა მხოლოდ ატომთა ბმულობა, არამედ სივრცეში მათი ურთიერთმდებარეობაც (სტრუქტურის ტოპოლოგია).

გ.ლეკიშვილის მიერ შემუშავებულია მოლეკულის სტერეო–მათემატიკური მოდელი, რომელიც აფიქსირებს მის სივრცულ სპეციფიკას, რაც შესაძლებელი გახდა კომპლექსური რიცხვების გამოყენებით.

აღნიშნული მიდგომის პოზიციიდან მოდიფიცირებული ვინერის რიცხვია:

$$W^{(i)}=1/2\sum_{k}^{n}\sum_{l}^{n} d^{i}_{k\ell} \qquad 19$$

სადაც: $d^{(i)}_{k\ell} = d_{k\ell} + i\beta_{k\ell}$

ამასთანავე შემოტანილია ვინერის რიცხვის ანალოგიური ინდექსი:

$$y_w = \sqrt{A^2 + B^2} - 0{,}1B|\,B\,| \qquad 20$$

სადაც: $A=Rl\,(W^{(i)})$, $B = Im(W^{(i)})$.

ეს ინდექსები საკმაოდ კარგად ასახავენ მოლეკულის სტერეოსტრუქტურულ სპეციფიკას.

2 . შედეგები და მათი განსჯა

ჩვენს მიერ ჩატარებულია ზოგიერთი სისტემის მათემატიკურ-ქიმიური კვლევა. ქვემოთ მოყვანილია ძირითადი შედეგები.

2.1. სწორხაზოვანი (ნორმალური) ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ნორმალური ალკანებისათვის პროფ. მ. გვერდწითელის, გ. ლეკიშვილის და ნაშრომის ავტორის მიერ შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$X\text{-}Y \qquad 21$$

სადაც: $X \equiv CH_3$, $Y \equiv CH_3$, C_2H_5, C_3H_7 , . . . y

შესატყვის $\Delta\widetilde{\text{რნბ}}$ - გააჩნია სახე:

$$\begin{Vmatrix} Z_x & 1 \\ 1 & Z_y \end{Vmatrix} \qquad 22$$

ცხრილი 3-ში მოყვანილია $lg(\widetilde{\Delta\text{რნბ}})$, $\sum_{lomo}^{calc}$ და I_1^{exp} (ნაერთის იონიზაციის პირველი პოტენციალი) ნორმალური ალკანებისათვის.

ცხრილი 3 . ნორმალური ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები იონიზაციის ენერგიები

ალკანი	$lg(\widetilde{\Delta\text{რნბ}})$	$\sum_{lomo}^{calc}$, ev	I_1^{exp} , ev
C_2H_6	1,90	12,21	11,76
C_3H_8	2,18	11,22	11,21
C_4H_{10}	2,35	10,72	10,80
C_5H_{12}	2,47	10,55	10,55
C_6H_{14}	2,57	10,41	10,43
C_7H_{16}	2,64	10,33	10,35
C_9H_{20}	2,77	(10,22)	(10,22)
$C_{10}H_{22}$	2,82	10,18	10,19
$C_{11}H_{24}$	2,86	(9,95)	(9,97)

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\sum_{lomo}^{calc} = -2{,}18 \lg (\Delta\ \widetilde{(\text{რნბ})}) + 16{,}08 \qquad 23$$

$$I_1^{exp} = -1{,}78 \lg (\Delta\ \widetilde{(\text{რნბ})}) + 15{,}0 \qquad 24$$

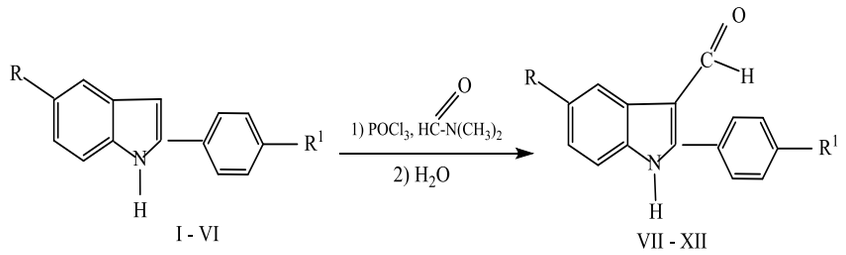
კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,986 და 0,987-ს. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

$\sum_{lomo}^{calc}$ და I_1^{exp} C_9H_{20} და $C_{11}H_{24}$ - თვის გამოთვლილია თეორიულად, (23) და (24) ფორმულების საფუძველზე (მოყვანილია ფრჩხილებში).

2.2. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

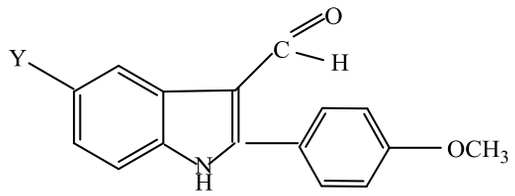
ჩვენს მიერ მიღებულია ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლი N, N-დიმეთილფორმამიდის და $POCl_3$ -ის გამოყენებით ოთახის

ტემპერატურაზე და მიღებულია ალდეჰიდები (VII- XII) :



R= H, CH_3, Cl; R^1= H, OCH_3 25

ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლი მატემატიკურ-ქიმიურად გამოვიკვლიეთ ქვაზი-რნბ-მატრიცის (*რ̃ნბ*) მეთოდით . ეს მატრიცა იგება შემდეგი ალგორითმის საფუძველზე: ქვაზი-რნბ-მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამები, ხოლო არადიაგონალური ელემენტები - სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის ქიმიური ბმების ჯერადობები. ზოგადად , საკვლევი ნივთიერებები შეიძლება ასე ჩავწეროთ:



26

სადაც : Y ≡ CH_3 , Cl, Br .

X არის მოლეკულის მთავარი სტრუქტურული ფრაგმენტი.

შესაბამის ქვაზი-რნბ-მატრიცას აქვს სახე :

$$\begin{Vmatrix} Z_y & 1 \\ 1 & Z_x \end{Vmatrix} \qquad 27$$

ჩვენ შევისწავლეთ lg(Δ(*რ̃ნბ*)) გამოყენების შესაძლებლობა ტოპოლოგიურ ინდექსად ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლებისთვის.

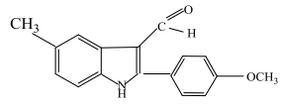
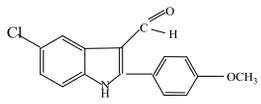
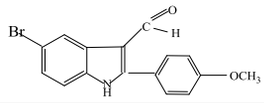
ჩაწერილია ორი კორელაციის განტოლება:

$T_{ლღ.} = 90 \lg(\Delta((\tilde{\text{რ}}\text{ნბ}) - 154$ 28

$R_{მოლ.} = 0{,}07 \lg(\Delta(\tilde{\text{რ}}\text{ნბ})) + 0{,}17$ 29

კორელაციის კოეფიციენტი r- შესაბამისად ტოლია 0.992, 0.991. ამრიგად ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით ადგილი აქვს ბრწყინვალე კოლერაციას.

ცხრილი 4. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერინდოლებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლღობის ტემპერატურები და მოლეკულური რეფრაქციები

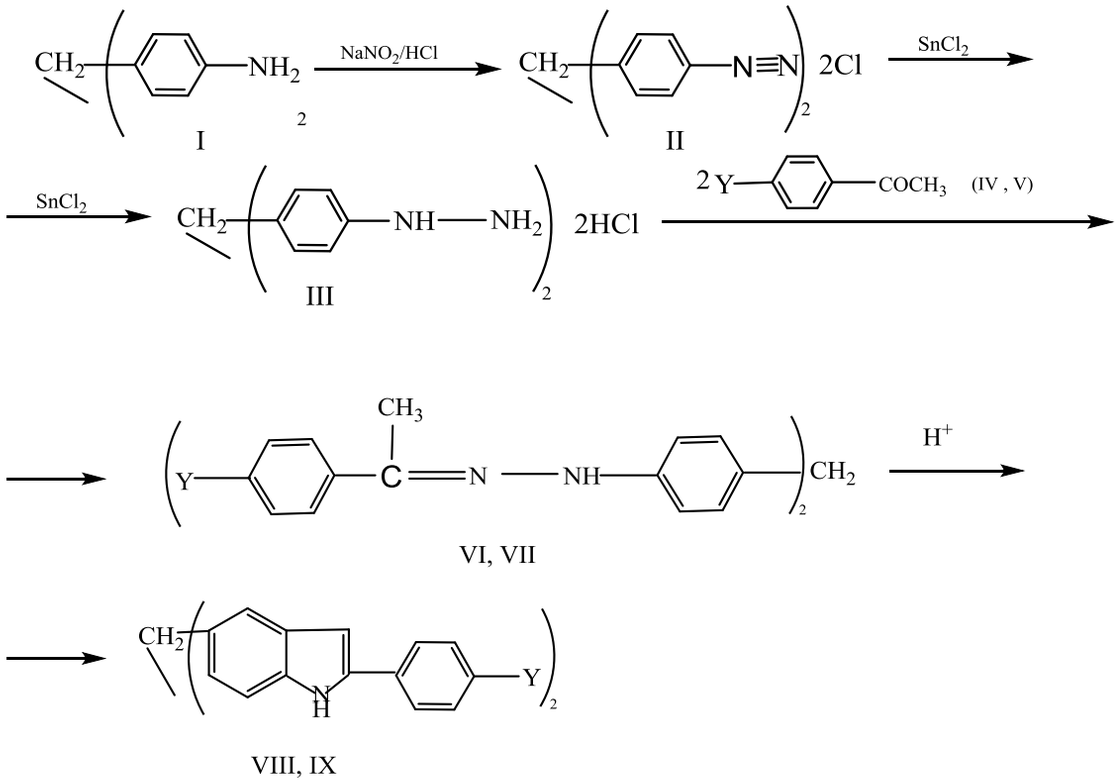
ნაერთი	lg(Δ(*რნბ*))	$T_{ლღ.}$ °C	$R_{f.}$
	3,07	122	0,38
	3,34	143	0,4
	3,6	(170)	(0,42)

$T_{ლღ}$ და $R_{მოლ.}$ 3-ფორმილ-5-ბრომ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლისთვის გამოთვლილია თეორიულად (28) და (29) ფორმულის საფუძველზე .

2.3. ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ჩვენს მიერ მიღებულია ზოგიერთი ბის (1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულები .

დიამინოდიფენილმეთანის დიაზოტირების პროდუქტის აღდგენით 4,4^{I}-დიჰიდრაზინოდიფენილმეთანია მიღებული,რომლის ურთიერთქმედებით პ-ბრომ- და პ-ნიტროაცეტოფენონებთან და წარმოქმნილი დიჰიდრაზონების შემდგომი ბიინდოლიზაციით მიღებულია 2,2^{I}-დი(პ-ნიტროფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)- და 2,2^{I}-დი(პ-ბრომფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანი (სქემა 1).

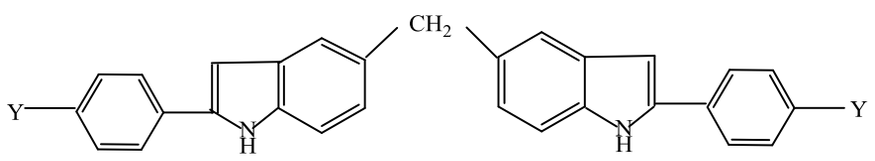


IV, VIII Y= NO_2 , V, IX Y= Br

სქემა 1. ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის სინთეზის სქემა.

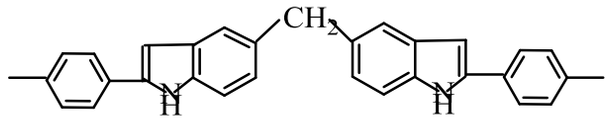
ჩვენს მიერ მიღებული ზოგიერთი ბის (1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულები მათემატიკურ-ქიმიურად გამოვიკვლიეთ ქვაზი-რნბ-მატრიცის (რ̃ნბ) მეთოდით, რომლის მიხედვითაც მიღებული შედეგი განხილული ფიზიკურ-ქიმიური თვისების მიმართ ემთხვევა ექსპერიმენტულად მიღებულ შედეგს.

ეს მატრიცა იგება შემდეგი ალგორითმის საფუძველზე: ქვაზი-რნბ-მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამები, ხოლო არადიაგონალური ელემენტები - სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის ქიმიური ბმების ჯერადობები. ზოგადად , საკვლევი ნივთიერებები შეიძლება ასე ჩავწეროთ:



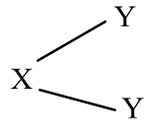
სადაც Y = NO_2 , Br , I .

X არის მოლეკულის მთავარი სტრუქტურული ფრაგმენტი:

X = 

31

მოლეკულას შეიძლება ზოგადად მივცეთ სახე:



32

შესაბამის ქვაზი-რნბ-მატრიცას აქვს სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_x & 1 & 1 \\ 1 & Z_y & 0 \\ 1 & 0 & Z_y \end{vmatrix} \qquad 33$$

სადაც დიაგონალური ელემენტები Z_x და Z_y არის , შესაბამისად , X და Y ფრაგმენტებში შემავალი ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამი, ხოლო არადიაგონალური ელემენტები კი ფრაგმენტებს შორის ბმების ჯერადობები.

ჩვენ შევისწავლეთ lg($\Delta\widetilde{\text{რნბ}}$) გამოყენების შესაძლებლობა ტოპოლოგიურ ინდექსად ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულებისთვის.

ჩაწერილია კორელაციის განტოლება:

$T_{\text{ლღ}}$= 372 lg($\Delta\widetilde{\text{რნბ}}$) - 1703 34

კორელაციის კოეფიციენტი ტოლია 0,990. ამრიგად ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით ადგილი აქვს ბრწყინვალე კორელაციას.

ცხრილი 5. ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლღობის ტემპერატურები

Y	lg($\Delta\widetilde{\text{რნბ}}$)	$T_{\text{ლღ.}}$
NO_2	5,04	172
Br	5,4	306
I	5,7	(418)

გამოთვლილია თეორიულად ლღობის ტემპერატურა 2,2[I]-დი(პ-იოდფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანისთვის (34) ფორმულის

საფუძველზე .

როგორც ზემოთ ავღნიშნეთ, ციკლიზაციის რეაქციები მიმდინარეობს სტრუქტურული სირთულის ზრდით, რომელიც რეაქციის წარმადობის შემფასებელია და გამოსავლიანობის უკუპროპორციულია, შესაბამისად 2,2[I]-დი(პ-ნიტროფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანის და 2,2[I]-დი(პ-ბრომფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანის გამოსავლიანობა დაბალია და შესაბამისად 6% და 13% შეადგენს.

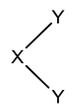
2.4. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:

$$[Pt(NH_3)_4]Hal_2 \qquad 35$$

სადაც: Hal = F, Cl, Br, I .

ჩვენს მიერ შემუშავებულია მოდელი:



36

სადაც: X≡ $[Pt(NH_3)_4]$, Y ≡ F, Cl, Br, I .

შესაბამის ფსევდო - რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_x & 1 & 1 \\ 1 & Z_y & 0 \\ 1 & 0 & Z_y \end{vmatrix} \qquad 37$$

ცხრილი 26-ში მოტანილია $lg(\Delta_{(\overline{\text{რნბ}})})$ და $T_{\text{დამლ.}}$ ამ ნაერთებისათვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{დამლ.}} = -72{,}00\ lg(\Delta_{(\overline{\text{რნბ}})}) + 536{,}16 \qquad 38$$

კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,987-ს. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 6. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების ტოპოლოგიური ინდექსები და დაშლის ტემპერატურები

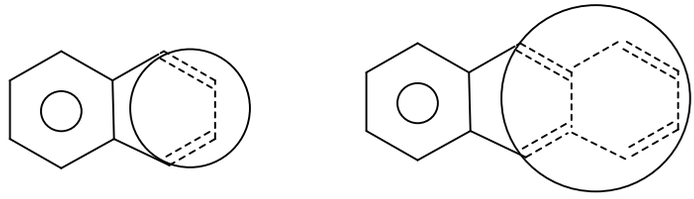
ნაერთები	$lg(\Delta_{(\overline{\text{რნბ}})})$	$T_{\text{დაშლ.}}$, ^0C
$[Pt(NH_3)_4]F_2$	3,98	(249,6)
$[Pt(NH_3)_4]Cl_2$	4,53	210
$[Pt(NH_3)_4]Br_2$	5,11	166
$[Pt(NH_3)_4]I_2$	5,53	138

$T_{\text{დაშლ.}}$ $[Pt(NH_3)_4]F_2$ -სათვის გამოთვლილია თეორიულად, (38) ფორმულის საფუძველზე (იხ. ზემოთ).

2.5. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

აღნიშნული სისტემების მათემატიკურ-ქიმიურ გამოსაკვლევად გამოყენებულია ტოპოლოგიური ინდექსი - ბლოკ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი - $lg(\Delta_B)$.

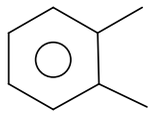
ბლოკ-მატრიცა იგება შემდეგი ალგორითმის საფუძველზე. ბენზოლის ბირთვი განიხილება ერთიან ,,ბლოკად", რომელზედაც ხდება სხვა სტრუქტურული ბლოკების წრფივად მიერთება. მაგალითად, ნაფტალინისა და ანტრაცენისათვის გვექნება:



39

ორივე ნაერთის შემთხვევაში ვიყენებთ მარტივ მოდელს:

$$X = Y \qquad 40$$

ამ მოდელში X შეესაბამება  სტრუქტურულ ფრაგმენტს, Y - მოლეკულის დანარჩენ ნაწილს. მოდელის შესაბამის B - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{Vmatrix} Z_x & 2 \\ 2 & Z_y \end{Vmatrix} \qquad 41$$

სადაც: Z_x –X სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ქიმიური ელემენტების რიგობრივი ნომრების ჯამია, Z_y –Y სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ქიმიური ელემენტების რიგობრივი ნომრების ჯამია, ,,2“ - აღნიშნავს ფორმალურ ორმაგ ბმას X და Y ფრაგმენტებს შორის.

ცხრილი 7-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_B)$, $-\chi_M \cdot 10^6$ (დიამაგნიტური ამთვისებლობა) და E/β (ბმების π - ელექტრონული ენერგია) ნაფტალინიდან ჰექსაცენის ჩათვლით.

ცხრილი 7. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადებისათვის ტოპოლოგირი ინდექსების, დიამაგნიტური ამთვისებლობის და ბმების π ელექტრონული ენერგიის მნიშვნელობები

ნაერთი	$\lg(\Delta_B)$	$-\chi_M \cdot 10^6$	E/β_0
ნაფტალინი	3,03	92,2	13,683
ანტრაცენი	3,33	130,3	19,314
ტეტრაცენი	3,51	168,0	24,931
პენტაცენი	3,63	205,4	30,544
ჰექსაცენი	3,72	(227,7)	(33,912)

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$-\chi_M = 250{,}0 \lg(\Delta_B) - 702{,}2 \qquad 42$$

$$E/\beta_0 = 37{,}433 \lg(\Delta_B) - 105{,}388 \qquad 43$$

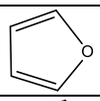
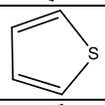
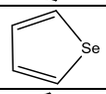
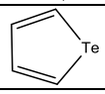
კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,989 და 0,988. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

$-\chi_M$ და E/β_0 ჰექსაცენისთვის გამოთვლილია თეორიულად, (42) და (43) ფორმულების საფუძველზე.

2.6. პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

მათემატიკური - ქიმიური მეცნიერებების ფარგლებში, ბლოკ–მატრიცების (B - მატრიცების) მეთოდის საფუძველზე ჩატარდა პიროლის პირველი იონიზაციის პოტენციალისა და მისი ჰალკოგენის ანალოგების გამოკვლევა .

ცხრილი 8. ჰეტეროციკლური ნაერთებისთვის მოყვანილია ტოპოლოგიური ინდექსები და ნაერთთა იონიზაციის პირველი პოტენციალი

ნაერთები	$\lg(\Delta_B)$	I_1 , eV
	2,34	10,32
	2,65	9,49
	2,98	9,18
	3,18	8,18

ამ ჰეტეროციკლური ნაერთების მარტივი მოდელი იყო განხილული:

$$X = Y \qquad 44$$

სადაც $X \equiv O, S, Se, Te$; $Y \equiv C_4H_4$, (259) მოდელის შესაბამის B – მატრიცას გააჩნია სახე :

$$\begin{Vmatrix} Z_X & 2 \\ 2 & Z_y \end{Vmatrix} \qquad 45$$

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციის განტოლება :

$$I_1 = -1{,}71 \lg(\Delta_B) + 14{,}32 \qquad 46$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ r კორელაციის კოეფიციენტი ტოლია 0,982. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

2.7. მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ჩატარებულია მეთანის ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. პროფ. თ წივწივაძის, პროფ. მ გვერდწითელის და ნ. ცეცაძის მიერ შესწავლილია ამ მრავალსტადიანი ჯაჭვური პროცესების უმნიშვნელოვანესი (სიჩქარის განმსაზღვრელი) სტადია:

$$CH_4 + Cl\bullet \longrightarrow CH_3\bullet + HCl \qquad 47$$

$$CH_4 + Br\bullet \longrightarrow CH_3\bullet + HBr \qquad 48$$

$$CH_4 + I\bullet \longrightarrow CH_3\bullet + HI \qquad 49$$

ამ პროცესებისათვის შემუშავებულია მარტივი მოდელი:

$$X\text{—}H + \bullet Y \longrightarrow X\bullet + H\text{—}Y \qquad 50$$

სადაც: $X \equiv CH_3$, $Y \equiv Cl, Br, I$.

(50) რეაქციის მატრიცული ჩანაწერია (ფსევდო- რნბ-მატრიცების სახით):

$$\left\| \begin{matrix} Z_x & 1 & 0 \\ 1 & Z_H & 0 \\ 0 & 0 & Z_y \end{matrix} \right\| \rightarrow \left\| \begin{matrix} Z_x & 0 & 0 \\ 0 & Z_H & 0 \\ 0 & 1 & Z_y \end{matrix} \right\| \qquad 51$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ ამ რეაქციისთვის $\Delta r > 0$. ამგვარად პროცესს ახლავს სისტემის სირთულის გაზრდა.

შენონის ინფორმაციის ენტროპია ტოლია:

$$H = -\Sigma P_i \log_2 P_i \qquad 52$$

სადაც : P_i - გარკვეული ცდომილების ალბათობაა.

შენონის მეთოდის მოდერნიზებული ვარიანტის ფარგლებში გამოვთვალეთ

$$H_r = H_f - H_i \qquad 53$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ (47) – (49) რეაქციებისათვის $H_r = 0,5376 > 0$. ამგვარად, პროცესი მიმდინარეობს სისტემის ინფორმატიულობის ზრდით.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\lg k = 2,80 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 6,99 \qquad 54$$

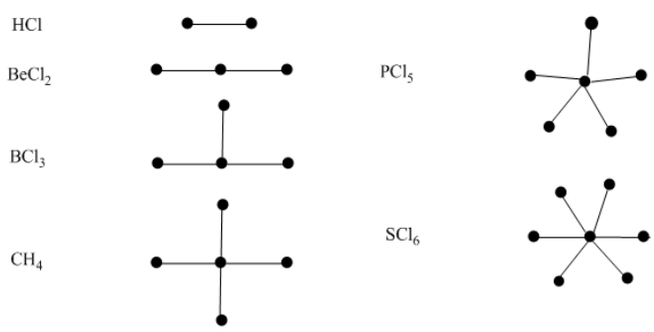
აქ $\Delta_{\text{რნბ}}$– ს ქვეშ იგულისხმება HY–ის (ჰალოგენწყალბადების) შესაბამისი $\Delta_{\text{რნბ}}$ -ს მნიშვნელობა, (რადგან ჰალოგენწყალბადი ამ სისტემის ერთადერთი ჭეშმარიტი მოლეკულური სტრუქტურაა) .

კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,982 . ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, ადგილი აქვს დამაკმაყოფილებელ კორელაციას .

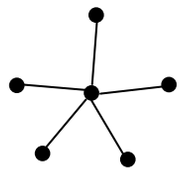
2.8. AB_n ტიპის მოლეკულები და გრაფი ,,ვარსკვლავის“ ერთი თვისება

გრაფს, რომლის ერთ-ერთი წვეროს ხარისხია n ($n \geq 2$), ხოლო დანარჩენების 1, ,,ვარსკვლავი“ ეწოდება. გრაფი ,,ვარსკვლავი“ წარმოადგენს რიგი მოლეკულების ფორმალურ ალგებრულ მოდელს (55) .

ქვემოთ მოყვანილია ,,ხუთქიმიანი ვარსკვლავი“ და მისი შესაბამისი ფსევდოთანაზიარობის მატრიცა (56). თანაზიარობის მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია წიბოების ჯერადობა (განხილულ შემთხვევაში - ,,1“ და ,,5“), არადიაგონალური - წვეროების ხარისხი (57) .



55



56

$$\begin{Vmatrix} 5 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \qquad 57$$

პროფ. მ. გვერდწითელის, ნ. ცეცაძის და გ. ჩახტაურის მიერ დამტკიცებულია <u>თეორემა:</u> გრაფი ,,ვარსკვლავის“ ფსევდოთანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტი ნულის ტოლია. ზოგადად ეს ასე ჩაიწერება:

$$\triangle \begin{Vmatrix} n & 1 & 1 & . & . & . & 1 \\ 1 & 1 & 0 & . & . & . & 0 \\ 1 & 0 & 1 & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . \\ 1 & 0 & 0 & . & . & . & 1 \end{Vmatrix} = 0 \qquad 58$$

დასკვნა

1. გაანალიზებულია საქართველოში მათემატიკური ქიმიის განვითარების ძირითადი მიმართულებები;
2. შესწავლილია იზომერების გენერაციისა და კლასიფიკაციის მეთოდები.
3. შეირჩეულია ზოგიერთი მნიშვნელოვანი ტოპოლოგიური ინდექსი და მათი აგების ალგორითმი.
4. შემუშავებულია სხვადასხვა ტიპის ქიმიური რეაქციის მათემატიკურ-ქიმიური მოდელი. აღმოჩენილია რეაქციის მსვლელობის კავშირი სისტემის სირთულის შეცვლასთან.
5. შესწავლილია განუშტოებელი ალკანები ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში;
6. შემუშავებულია ტოპოლოგიური ინდექსი ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის გამოკვლევისთვის;
7. განსაზღვრულია ქვაზი-რნბ-მატრიცის(რ$\widetilde{\text{ნ}}$ბ) მეთოდი ჩვენს მიერ მიღებული ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის მატემატიკურ-ქიმიურად გამოკვლევისთვის ;
8. გამოკვლეულია ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენიდები ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში;
9. შემუშავებულია ბლოკ-მატრიცა (B) და ახალი ტიპის ტოპოლოგიური იდექსის-ბლოკ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი lg(ΔB) წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების გამოკვლევისთვის;
10. ბლოკ-მატრიცის (B) მეთოდის ფარგლებში გამოკვლეულია პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგები ;
11. შესწავლილია მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციები ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდისა და შენონის მოდერნიზებული ინფორმაციის ენტროპიის მეთოდის ფარგლებში;
12. დადგენილია გრაფი ,,ვარსკვლავის'' გამოყენების შესაძლებლობა ქიმიური ნაერთების ფორმალურ-ალგებრულ მოდელად.

დამტკიცებულია თეორემა: გრაფი ,,ვარსკვლავის'' ფსევდოთანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტი ნულის ტოლია.

;

ნაშრომის თემატიკაზე გამოქვეყნებული შრომების ნუსხა:

1. G. Lekishvili, M. Gverdtsiteli, N. Tsetsadze. Mathematical-chemical Investigation of some straight – chained Alkanes. Bull. Georg. Nat. Acad. Sci., 2011, 5(3), p. 74.
2. წივწივაძე თ. ი., ცეცაძე ნ. რ. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ-ინდოლის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა Georg. Eng. News, 2020, 85(2), გვ. 121-122.
3. N. Tsetsadze Mathematical-Chemical Investigation of some Derivatives of Bis (1H-indolo-5-yl)Methane . Bull. Georg. Natl. Acad. Sci., vol. 15, no. 1, 2021. P. 20-22.

Abstract

One of the most important problems of modern chemistry is to determine the dependence of the regularities of the properties of substances and ability to react on the structure of molecules. The main means of influencing correlations of the "Composition-structure-property" is their mathematical modeling. According to the theory of chemical graphs, which is widely used for modeling chemical and biological processes, the mathematical model of a molecule is a graph-discrete-algebraic object, and the invariants (topological indices) are discussed in mathematical descriptors of chemical structures in a number of "structure-properties" statistical correlations.

In the work we discuss the elements of higher algebra - graphs, matrices, determinants and their application to chemical systems. The above mathematical constructions represent the basic notions of modern theoretical organic chemistry, which are very actual today and serve its further development.

The dissertation can be said is based on four topological indexes developed (from many) by the Georgian School of Mathematical Chemistry (Prof. Mikheil Gverdtsiteli), which are based on RNA-, quasi-RNA-, pseudo-RNA- and EP-matrices and represent dozens of logarithms of the determinant values of these matrices.

The dissertation defender analyzes in detail the structures of the above matrices, and rightly points out that the rank of the RNA matrix is equal to the number of atoms in its corresponding molecule, so calculation is quite time-consuming for relatively large molecules. It was for this reason that the RNB matrix was modernized into a quasi-RNB matrix ((RNA),), which allows not only to adequately reflect the specifics of the structure of a particular molecule, but also to significantly reduce the calculation time. Such an approach allows the molecule to emerge as a system consisting of a major structural fragment, a substituent, and a reaction center.

In the case of structural characterization, it is advisable to discuss the atoms in isolation and Pseudo-RNA matrices (RNAs) are used, the diagonal elements of which are both the ordinal number of individual atoms and the sum of the ordinal numbers of elements in different structural fragments. In the case of the EP-matrix, the diagonal elements are the electro negativity of the chemical elements in the molecule, the non-diagonal is the polarity of the corresponding bonds, and dozens of logarithms of the determinant of the matrix are lg (ΔEp).

For algebraic assess of the complexity of structural changes in organic reactions made by the dissertation defender, an algebraic model of the structural complexity of chemical reactions is constructed, based on which it is determined that their determinants form a new set of topological indexes that can be used as "structural" correlation in the separate homologous rows.

The researcher has carried out mathematical-chemical research of some systems for normal alkanes, some 3-formyl-2-phenylmethylethyl indole, bis- (1H-indol-5-yl) methane derivatives under the quasi-RNA-matrix method,and has developed the simplest model, correlation equations are built on the computer, Correlations according to Jaffa criteria are satisfactory.

Mathematical-chemical investigation of tetraminoplatin (II) dialogenization has been carried out within the framework of the pseudo-RNA-matrix method, a model

and the corresponding pseudo-RNA-matrix form have been developed. The table shows - lg (Δ (RNB) ¯) and T decomposition. For these compounds there is the correlation equation built on the computer, the correlations, according to Jaffe criterion are satisfactory. T dislocation. For tetraaminodiphthoride is theoretically calculated based on the corresponding formula.

The dissertation defender carried out a mathematical-chemical study of linearly condensed benzene nuclei under the block matrix method and developed a new type of topological index - the decimal logarithm of the determinant of the block matrix lg(ΔB). Based on the following logarithm, a block matrix is constructed and the benzene nuclei are considered as a single "block" on which other structural blocks are joined linearly (eg for naphthalene and anthracene), and in both compounds a simple model is used in which X corresponds to a certain structural fragment Y, the rest part of the molecule.

The corresponding B-matrix of the model has a certain shape: Zx-X and Zy-Y are the sum of the serial numbers of the chemical elements in the structural fragment: There is a formal double bond between the X- and Y-fragments. Also there are represented lg (Δ_B), $-\chi M\cdot 10^6$ (diamagnetic assimilation) and E / β (bond π-electron energy) for hydrocarbons containing linearly condensed benzene nuclei from naphthalene to hexacene.

Correlation equations are built on the computer and are made calculates correlation coefficients that are satisfactory according to the Jaffa criterion.

N. Tsetsadze conducted a mathematical-chemical study of methane radical halogenation reactions within the framework of the pseudo-RNA-matrix method, which includes the most important (velocity-determining) stages of chain processes.

A simple model X-K + · Y → X → + H-Y has been developed for all these processes, where X≡CH_3, Y≡Cl, Br, I. The reaction matrix record is in the form of pseudo-RNA matrices. The calculations show that for this reaction >r> 0. Therefore, the process is accompanied by an increase in the complexity of the system.

The correlation equation is constructed on the computer and the corresponding correlation coefficient (r) is calculated, which has a satisfactory correlation according to the Jaffa criterion.

Of some importance are the molecules of the type ABn and the graph of one property of a star, one of the vertices of which is n (n≥2), and the other 1 and which is called a "star". The "five-pointed star" and its corresponding pseudo-communion matrix are given. The diagonal elements of the communion matrix are the multiplicity of the vertices (in this case - "1" and "5"), and the degree of the non-diagonal vertices, the authors have confirmed the theorem that the determinant of the pseudo-communion matrix of the graph "star" is zero. The graph "star" is a formal algebraic model of a number of molecules.

The results of the work have great theoretical and practical importance for the development of mathematical chemistry in Georgia. Based on the obtained results, it is possible to reveal the "structure-physical-chemical properties" correlations for different classes of inorganic, complex compounds and organic chemistry. Through constructed topological indices it is possible to characterize the kinetic characteristics of the transformations of compounds in the algebraic-chemical aspect.

The main results of the work performed ("Structure - Properties") can be used in the reference and information literature, for reading of the chapters selected in the chemistry lecture course, and in experimental work in scientific research laboratories.