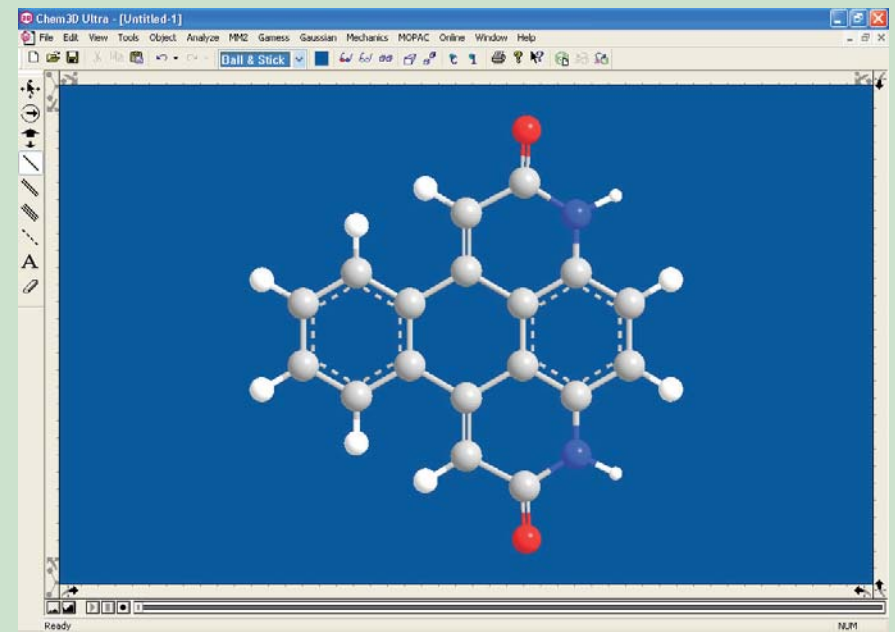


# ქიმიკა ღა პერსონალური კომპიუტერი

ე . ელიზბარაშვილი, ლ. გვასალია



ტექნიკური უნივერსიტეტი ♦ 2005

ე. ელიზბარაშვილი, ლ. გვასალია

## ქიმია და პერსონალური კომპიუტერი



დამტკიცებულია დამხმარე  
სახელმძღვანელოდ სტუ-ს  
სარედაქციო-საგამომცემლო  
საბჭოს მიერ

თბილისი  
2005

პერსონალური კომპიუტერები სულ უფრო მეტ გამოყენებას პოულობენ მეცნიერებისა და ტექნიკის ყველა დარგში. გამონაკლისი არც ქიმია და ქიმიური ტექნოლოგიაა. სხვადასხვა მძლავრი კომპანიებისა და ცალკეული სამეცნიერო ჯგუფების მიერ შექმნილია რამდენიმე ათეული ქიმიური პროგრამა პერსონალური კომპიუტერებისათვის, რომლებიც საშუალებას იძლევიან უსწრაფესად გადაიჭრას ნებისმიერი სირთულის ქიმიური და ქიმიურ-ტექნოლოგიური ამოცანები. ამ პროგრამების გამოყენება მომხმარებლისაგან გარკვეულ ცოდნას მოითხოვს.

სახელმძღვანელო, რომელიც განკუთვნილია უნივერსიტეტების ქიმიური და ქიმიურ-ტექნოლოგიური ფაკულტეტის სტუდენტებისათვის, ვფიქრობთ, კარგ მეგზურობას გაუწევს მათ ქიმიური პროგრამების მრავალფეროვან ლაბორინტებში გზის გასაკვლევადა. სახელმძღვანელო, სტუდენტების გარდა, დაეხმარება ქიმიის დარგში მომუშავე სხვა მომხმარებელსაც.

რეცენზენტები: პროფ. ვ. კერესელიძე,  
დოც. მ. რაზმაძე,

© გამომცემლობა „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, 2005  
ISBN 99940-48-12-0

# 1. პროგრამების კლასიფიკაცია

დღეისათვის ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიისათვის უამრავი კომპიუტერული პროგრამაა შექმნილი. მათ შექმნაზე მუშაობენ როგორც მძლავრი კომპანიები და კორპორაციები, ისე ცალკეული სამეცნიერო ჯგუფები. ცნობილი კორპორაციებიდან აღსანიშნავია Advanced Chemistry Development Inc., CambridgeSoft Inc., HyperCube Inc., MDL Information System Inc და სხვა.

შექმნილი პროგრამული პაკეტებისა და ცალკეული პროგრამების კლასიფიკაცია შესაძლებელია მოვანდინოთ სხვადასხვა პრინციპის მიხედვით. დანიშნულების მიხედვით არჩევნ შეგვეძლოს პროგრამებს:

1. **საინფორმაციო და საილუსტრაციო პროგრამები**, რომელთა დანიშნულებაა ყოველგვარი გაანგარიშების გარეშე წარმოაჩინონ გარკვეული ინფორმაცია. მაგალითად ელექტრონული ქიმიურ ელემენტთა პერიოდული სისტემა (Table, TableRus, EniG Table), ქიმიური რეაქციების სახელობითი კატალოგი (Named Organic Reactions), ქიმიური და ფიზიკური კონსტანტების მნიშვნელობები (Constants) და სხვა.
2. **გრაფიკული პროგრამები**, რომელთა საშუალებითაც შესაძლებელია ქიმიური ფორმულების, მოლეკულების, ქიმიური რეაქციის სისტემებისა და ტექნოლოგიური სქემების გრაფიკული რედაქტირება. თავის მხრივ გრაფიკული პროგრამები შეიძლება დაიყოს ორგანოზომილებიან (2D-გრაფიკა) და სამგანზომილებიან (3D-გრაფიკა) გრაფიკულ პროგრამებად. პირველის საშუალებით შესაძლებელია „ბრტყელი“ სტრუქტურების, ხოლო მეორის - სივრცული მოლეკულების აგება. 2D გრაფიკული პროგრამებია ChemSketch, ChemDraw, ISIS Draw, WinChemDraw, ChemWindow, Chemistry 4-Draw

და სხვა, ხოლო 3D პროგრამებია - Chem3D, 3D View, HyperChem და სხვა.

3. **პროგრამები მარტივი გაანგარიშებისათვის**, რომელთა საშუალებითაც წარმოებს მარტივი ქიმიური პროცესებისა და სიდიდეების (მოლეკულური მასა, დუბლილის ტემპერატურა, გარდატეხის მაჩვენებელი და სხვა ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრები) გაანგარიშება. ასეთი სახის პროგრამები უამრავია. ზოგჯერ ერთი და იგივე ამოცანის გადაჭრისათვის არსებობს მრავალი სხვადასხვა დასახელების (სხვადასხვა ავტორის მიერ შექმნილი) პროგრამა. აღნიშნული ტიპის პროგრამებია ChemAssistant, ChemExpert, ChemMaths და სხვა. აქვე შეიძლება ცალკე დიდ ჯგუფად გამოიყოს სპექტრების დამუშავებისა (SpecViewer) და გრაფიკების აგების (DATAN, Enzfilter, GraFit, PeakFit, SigmaPlot, TableCurve) პროგრამები.
4. **ქიმიური მოდელირების პროგრამები**, რომელთა საშუალებითაც წარმოებს ქიმიური სისტემების მოდელირება: გეომეტრიული ოპტიმიზაცია, მოლეკულური მექანიკა, კვანტურ-ქიმიური მოდელირება. აღნიშნული გაანგარიშებების ჩატარება შესაძლებელია მაგალითად Chem3D და HyperChem პროგრამებით.
5. **ქიმიური ანიმაციური პროგრამები**, რომელთა საშუალებითაც ხორციელდება ქიმიური პროცესების ანიმაცია, რაც ქიმიური რეაქციებისა და მათი მექანიზმების თვალსაჩინოდ წარმოჩენას ემსახურება. ამ ტიპის პროგრამებიდან შეიძლება აღვნიშნოთ პროგრამა MoluCad და Chem3D.
6. **ქიმიური პროგრამა - ბროუზერები**, რომელთა საშუალებითაც წარმოებს როგორც გლობალურ, ისე ლოკალურ ქსელში ქიმიური ინფორმაციის მოძიება. აღნიშნული პროგრამების საშუალებით ბევრად მარტივდება ინფორმაციის მიღება მსოფლიო ქიმიური მონაცემთა ბანკებიდან. მაგალითად ცნობი-

ლი ბელშტეინის საინფორმაციო სამსახურიდან ინფორმაციის მიღება შეუძლებელია პროგრამა-ბროუზერის Belstein Commander-ის გამოყენების გარეშე. ამ ტიპის პროგრამებიდან აღსანიშნავია ChemOffice-ის პაკეტი შემაჯავლი პროგრამები ChemFinfer და ChemFinfer for Office.

7. **ქიმიური მონაცემთა ბაზების პროგრამები**, რომელნიც განკუთვნილი არიან ქიმიურ მონაცემთა ბაზებთან მუშაობისათვის. ქიმიურ მონაცემთა ბაზებში ზოგად მონაცემთა ბაზებისაგან განსხვავებით ორგანიზებულია ქიმიური სტრუქტურების ჩაწერის შესაძლებლობაც.

მონაცემთა ბაზებთან მომუშავე პროგრამები შეიძლება დაიყოს ორ ტიპად. პირველი სახის პროგრამების - ანუ კატალოგების დანიშნულებაა მზა მონაცემთა ბაზებიდან ინფორმაციის მოძიება და წარმოჩინება. აღნიშნული მონაცემთა ბაზები დახურულია, ანუ მათში რაიმე ახალი ინფორმაციის ჩაწერა-დამატება შეუძლებელია. დღეისათვის შექმნილია მრავალი ასეთი კატალოგი:

- **ქიმიური მონაცემთა ბაზა (Chemical Database)** - იგი მოიცავს არაორგანულ და ორგანულ ნაერთთა ძირითად ფიზიკურ-ქიმიურ კონსტანტებს;
- **სამკურნალო საშუალებების მონაცემთა ბაზა (Prescription Drug Database)** - მოიცავს წამლების დასახელებას, ძირითადი სამკურნალო პრეპარატის დასახელებას, შედგენილობას, სამრეწველო დასახელების სინონიმებს, დანიშნულებას, და ა.შ.;
- **ტოქსიკოლოგიური მონაცემთა ბაზა (Human and Animal Developmental Toxicology, Amphibian Developmental Toxicology, Industrial Solvent Developmental Toxicology)** - მოიცავს ნაერთების ტოქსიკოლოგიურ პარამეტრებს;

- იწ, <sup>1</sup>H-ბმრ, მას-სპექტრების მონაცემთა ბაზები (Aldrich FT-IR Library, Aldrich vapor-phase FT-IR Library, NIST/EPA/MSDC Mass Spectral Database და სხვა) - მოიცავს ათათასობით ნაერთის სპექტრალურ მონაცემებს;
- **რეკციებისა და ქიმიური სინონიმების მონაცემთა ბაზა (Chemical Thesaurus)** - მოიცავს ნაერთების დასახელების სინონიმებს, ქიმიური რეაქციის ტიპებს, ნაერთების ფიზიკურ-ქიმიურ თვისებებსა და მიღების მეთოდებს.

მეორე ტიპის მონაცემთა ბაზებთან მომუშავე პროგრამებს არ გააჩნიათ საკუთარი მონაცემთა მზა ბაზები. მათი დანიშნულებაა თავად უზრუნველყონ მომხმარებლის სურვილის მიხედვით ქიმიური მონაცემთა ბაზების შექმნა და აწარმოონ ძიება როგორც ტექსტურ, ისე სტრუქტურულ რეჟიმში. აღნიშნული სახის პროგრამებიდან აღსანიშნავია ChemFinder (პაკეტი ChemOffice) და MolSearch Database Software. მათი საშუალებით შესაძლებელია 10 მლნ-ზე მეტი ჩანაწერის მქონე ქიმიური ბაზის შედგენა, რომელიც შეიძლება შეიცავდეს ქიმიურ სტრუქტურას (მისი აგება წარმოებს უშუალოდ მონაცემთა ბაზის პროგრამით, ვინაიდან იგი მოიცავს ჩაშენებულ ფორმულების მიკრორედაქტორს), მოლეკულურ მასას, დასახელებას და სხვ.

ქიმიური პროგრამების კლასიფიკაცია შეიძლება დაგაფუძნოთ მათი მოქმედების პრინციპზე. ამ მხრივ არჩევენ **კომპლექსურ** და **სპეციფიკურ** პროგრამებს. კომპლექსური პროგრამები მოიცავენ ზემოთ აღნიშნული კლასიფიკაციის რამოდენიმე პუნქტს ერთდროულად, ანუ მათი საშუალებით შესაძლებელია როგორც გრაფიკაში მუშაობა, ისე გაანგარიშებების შესრულება. ამიტომ არის, რომ ერთი და იგივე პროგრამა კლასიფიკაციის რამოდენიმე პუნქტში მეორდება. სპეციფიკური პროგრამები გაცილებით მცირე ზომის პროგრამებია (კომპლექსური პროგრამებისაგან განსხვავებით), რომელთა დანიშნულებაა მხოლოდ ერთი რაიმე კონკრეტული სახის დავალების შესრულება.

მაგალითად, კონცენტრაციის, მოლეკულური მასის, მჟავიანობის და ა.შ. გაანგარიშება.

პროგრამების კლასიფიკაცია შეიძლება მოვახდინოთ **ქიმიური სფეროში** გამოყენების თვალსაზრისით - ანუ პროგრამები, რომლებიც იხმარება ორგანულ, არაორგანულ, ფიზიკურ, ანალიზურ და ა.შ. ქიმიაში. აქვე უნდა აღინიშნოს ლაბორატორიის მენეჯმენტისა (STIS-Sample Tracking and Inventory System, IMCSPro-Instrument Maintenance & Calibration System Pro, Laboratory Document Control System, LabTrack - ლაბორატორიული ელექტრონული ბლოკნოტი) და გარემოს დაცვის კონტროლის (Control Chart Pro, Control Chart Pro Plus Datalink) პროგრამები.

მიუხედავად პროგრამების ასეთი სიმრავლისა, არ არსებობს უნივერსალური პროგრამა, რომელიც ქიმიკოსის წინაშე დასმულ ყველა ტიპის ამოცანას გადაჭრიდა. ასეთი უნივერსალური პროგრამის შექმნა მთელ რიგ სირთულეებთანაა დაკავშირებული. მათგან პირველ რიგში აღსანიშნავია ასეთი პროგრამების დიდი ფიზიკური ზომა და კომპიუტერული ტექნიკისადმი გაზრდილი მოთხოვნილებანი, რაც ამცირებს პრაქტიკული გამოყენების ეფექტურობას. ამასთანავე პროგრამის მოქმედების სიჩქარე მკვეთრად მცირდება, არადა ისეთი რთული ქიმიური გაანგარიშებებისათვის, როგორცაა ქვანტურ-ქიმიური გაანგარიშებები, დრო უმნიშვნელოვანესი ფაქტორია. ამ პრობლემის გადასაჭრელად რამოდენიმე წამყვანმა კორპორაციამ (ACD Labs, CambridgeSoft) შეიმუშავა მეტად ეფექტური მიდგომა. კერძოდ, ერთი უნივერსალური პროგრამის შექმნის ნაცვლად ისინი აწარმოებენ პროგრამულ პაკეტს, რომელშიც შედის ცალკეული პროგრამები, რომლებიც მუშაობენ როგორც ავტონომიურ, ისე კომპლექსურ რეჟიმში - ანუ შესაძლებელია ერთი პროგრამიდან ინფორმაციის მეორე პროგრამაში გადატანა. მაგალითად, CambridgeSoft-ის მიერ შექმნილი ქიმიური პროგრამების პაკეტი ChemOffice მოიცავს ხუთ დამოუკიდებელ, მაგრამ ერთმანეთთან ადაპტირებულ პროგრამას: ChemDraw, Chem3Dm, ChemFinder, ChemInfo, Table Editor. მაგალითად, ACD Labs-ის პაკეტი

ChemSketch კი რამოდენიმე ათეულ დამოუკიდებელ, ქიმიის ნებისმიერი სფეროსათვის გამოსაყენებელ პროგრამას მოიცავს.

აღსანიშნავია, რომ მიუხედავად დიდი პროგრამების პოპულარობისა, ზოგიერთ შემთხვევაში, შედარებით მცირე ზომის, მაგრამ მხოლოდ კონკრეტული ამოცანის გადაწყვეტისათვის შექმნილი პროგრამები გამოყენების თვალსაზრისით უფრო ეფექტურები არიან.

## 2. საცნობარო პროგრამები

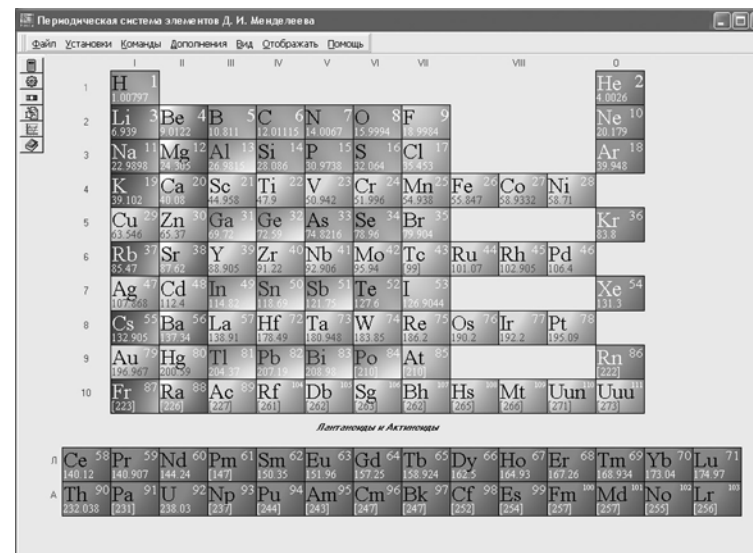
### 2.1. ქიმიურ ელემენტთა ელექტრონული პერიოდული ტაბულა (პროგრამა TableRus-3.40)

ერთ-ერთი ყველაზე ცნობილი და პოპულარული საცნობარო პროგრამა არის ელექტრონული პერიოდული ტაბულა. მის პოპულარობაზე მეტყველებს ის ფაქტიც, რომ მისი რამდენიმე ასეული პროგრამული გადაწყვეტა არსებობს. ცხადია, ყველა პროგრამის საერთო სახეს წარმოადგენს ელემენტების (მენდელეევის) პერიოდული ტაბულა (როგორც გრძელპერიოდებიანი ისე მოკლეპერიოდებიანი ვარიანტი). ელექტრონული პერიოდული ტაბულის თანამედროვე ვერსიები აღჭურვილია დამატებითი ფუნქციებითაც. კერძოდ, ზოგიერთ პროგრამას დართული აქვს ქიმიური კალკულატორი, რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია მოლეკულური მასის ანგარიში, ქიმიური რეაქციის სტექიომეტრიული კოეფიციენტების დადგენა, აგრეთვე შესაძლებელია ელემენტის შესახებ დამატებითი ინფორმაციის ავტომატური მოძიება ინტერნეტში (თუ კომპიუტერი ჩართულია გლობალურ ქსელში) და სხვა.

ელექტრონული პერიოდული ტაბულის პროგრამების დასახელებებია: Table, TableRus (პროგრამის რუსულენოვანი ვარიანტი), TableEniG და სხვა.

ჩვენს მიერ განხილული იქნება პროგრამა TableRus, რომელიც მრავალფუნქციური პროგრამაა. გარდა ამისა, მის დადებით მხარეზე მეტყველებს მისი კომპაქტურობაც. საინტალაციო ფაილი იკავებს 1.04 MB-ს. დღეისათვის გამოშვებულია 3.40-ე ვერსია, რომელიც სწრაფად განიცდის განახლებას.

პროგრამის TableRus-ის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 1-ზე. იგი მოიცავს ოპერაციული სისტემის Windows ქვეშ მომუშავე პროგრამების სტანდარტულ ინსტრუმენტებს - სატიტულო ხაზს, მინიმუმაცია-მაქსიმუმაციისა და დახურვის ღილაკებს, მენიუს ზოლს.



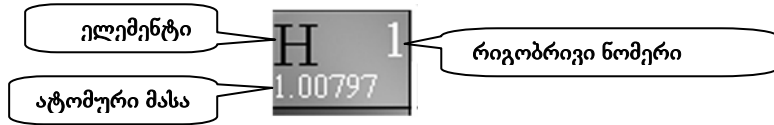
ნახ. 1. პროგრამა TableRus-3.40-ის ინტერფეისი

პროგრამის სამუშაო სივრცეს წარმოადგენს მოკლე-პერიოდებიანი პერიოდული ტაბულა. ელემენტების ფონი და სიმბოლოები შესრულებულია სხვადასხვა ფერით. ელემენტების სიმბოლოების ფერის მიხედვით შესაძლებელია გაკარჩიოთ:

- მუქი მწვანე - ტუტე მეტალი
- ყავისფერი - ტუტე-მიწა მეტალი
- წითელი - მეტალი
- შავი - გარდამავალი მეტალი
- ცისფერი - იშვიათმიწათა მეტალი
- ლურჯი - არამეტალი
- ნარინჯისფერი - ჰალოგენი

- იასამნისფერი - კეთილშობილი აირი

პერიოდული ტაბულის თითოეული გრაფა მოიცავს სტანდარტულ სიდიდეებს: ელემენტის სიმბოლოს, რიგობრივ ნომერსა და ატომურ მასას (ნახ. 2).



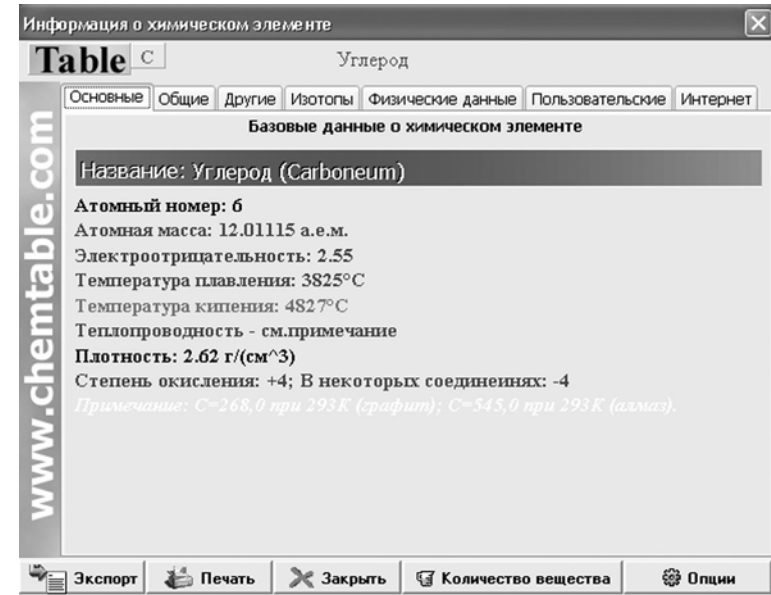
ნახ. 2. ელექტრონული პერიოდული ტაბულის ერთ-ერთი გრაფა

პერიოდულ ტაბულაზე ატომური მასის ნაცვლად შესაძლებელია გამოტანილი იქნას სხვა სახის ინფორმაცია. მისი გამოძახება ხდება მენიუდან **Отображать** (გამოსახვა). მომხმარებლის წინაშე დგას საკმაოდ დიდი არჩევანი შეარჩიოს შემდეგი სახის მონაცემები: ელემენტის დასახელება, ატომური მასა, ელექტროგამტარობა, ელემენტის აღმოჩენის წელი, ზეგამტარმდგომარეობაში გადასვლის, ტემპერატურა, იონიზაციის მეორე და მესამე საფეხურის პოტენციალები, ელექტროუარყოფითობა, კოვალენტური და ატომური რადიუსი, ატომური მოცულობა, დაშლისა და ორთქლადქცევის სითბო, კრისტალური მესერის სტრუქტურა, კუთრი თბოტევადობა, დაჟანგულობის ხარისხი, დუღილისა და ლღობის ტემპერატურა, სიმკვრივე და სხვა მახასიათებლები.

პროგრამის ინტერფეისი შეიძლება წარმოდგინდეს გამარტივებული და ფუნქციონალური სახით. პროგრამის გამარტივებული სახის გამოძახება შეიძლება ბრძანებით **Упрощенный** (გამარტივებული) მენიუდან **Вид** (სახე), ხოლო ფუნქციონალურისა კი ბრძანებით **Функциональный** (ფუნქციონალური). უკანასკნელი რეჟიმის დროს შესაძლებელია სტილების ცვლილება, რომლის შედეგადაც იცვლება ისეთი პარამეტრები, როგორცაა ელემენტების გამოსახვის ფერი, ელემენტების გრაფის ფონის ფერი, თვით პერიოდული ტაბულის ფონი და სხვა მრავალი.

ამა თუ იმ ელემენტის შესახებ შედარებით სრული ინფორმაციის მიღება შესაძლებელია შესაბამისი ელემენტის გრაფაზე თავუნას მარცხენა ღილაკის ორჯერადი დაწკაპუნებით.

ცალკეული ელემენტის შესახებ დამატებითი ინფორმაცია მიიღება ახალი დიალოგის ფანჯარის საშუალებით, რომელსაც შვიდი გადასართავი აქვს. პირველი გადასართავი გვიჩვენებს ელემენტის ძირითად პარამეტრებს (ნახ. 3). იგი ავტომატურად გამონათდება ეკრანზე ელემენტზე დაწკაპუნებით. ქიმიური ელემენტის ძირითად პარამეტრებს



ნახ. 3. ელემენტის შესახებ ძირითადი ინფორმაციის დიალოგის ფანჯარა

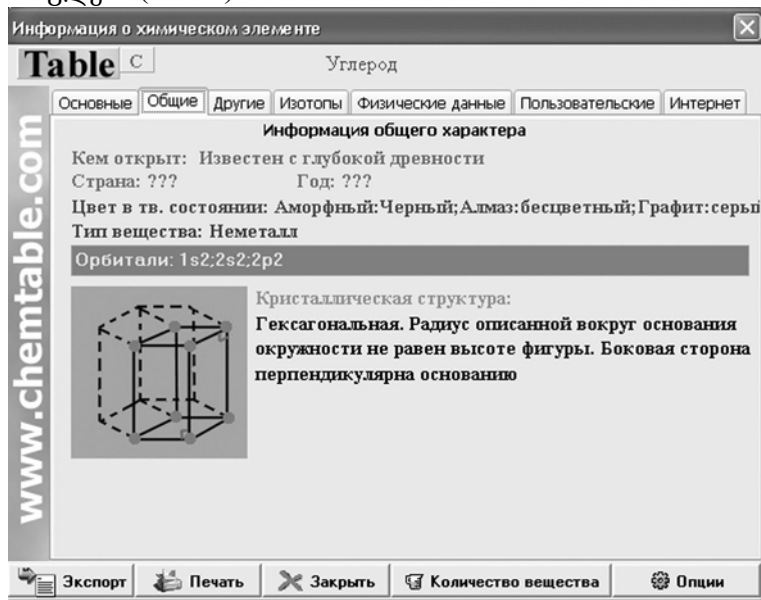
წარმოადგენს ისეთი ფიზიკურ-ქიმიური სიდიდეები, როგორებიცაა

- ელემენტის დასახელება

\* შენიშვნა. გამარტივებული რეჟიმის დროს დამატებითი ინფორმაცია გამოიძახება ორჯერადი დაწკაპუნებით.

- ატომური ნომერი
- ატომური მასა
- ელექტროუარყოფითობა
- დუღილის ტემპერატურა
- ლღობის ტემპერატურა
- თბოგამტარობა
- სიმკვრივე
- დაჟანგულობის ხარისხი

შემდეგი გადასართავით **Общие** (საერთო) შესაძლებელია ელემენტის შესახებ ზოგადი სასიათის ინფორმაციის მიღება, როგორცაა ელემენტის აღმოჩენის მდგომარეობა, აღმოჩენის წელი, ფერი და აგრეგატული მდგომარეობა, ორბიტალზე ელექტრონების განლაგება და კრისტალური მესერის გეომეტრიული ფორმის გრაფიკული გამოსახულება (ნახ. 4).



ნახ. 4. ელემენტის შესახებ ზოგადი სახის ინფორმაციის დიალოგის ფანჯარა

ელემენტის იონიზაციის პირველი და მეორე საფეხურის პოტენციალის, კოვალენტური და ატომური რადიუსის, დაშლისა და ორთქლადქცევის სითბოს მნიშვნელობების ნახვა შესაძლებელია მესამე გადასართავით **Другие** (სხვა).

გადასართავით **Изотопы** (იზოტოპები) შეგვიძლია მივიღოთ ინფორმაცია ბუნებაში ელემენტის იზოტოპების გავრცელების, მისი მასის, სპინის, იზოტოპების ნახევარდაშლის პერიოდისა და დაშლის ფორმების შესახებ.

გადასართავი **Физические данные** (ფიზიკური მონაცემები) კიდევ უფრო ამომწურავ ინფორმაციას იძლევა თითოეული იზოტოპის შესახებ. კერძოდ, ცალკეული იზოტოპისათვის თუ რა სახის დაშლის თერმობირთვული რეაქციებია შესაძლებელი.

ზემოთჩამოთვლილი ინფორმაცია თუ საკმარისი არ არის მომხმარებლისათვის, პროგრამა **TableRus** საშუალებას გვაძლევს კომპიუტერის ინტერნეტში ჩართვის შემთხვევაში, დამატებითი ინფორმაცია გადმოიტვირთოს ისეთი ცნობილი ვებ-საიტებიდან, როგორცაა **WebElements Periodic Table** ([www.webelements.com/webelements/elements/text/](http://www.webelements.com/webelements/elements/text/)) და **Los Alamos National Laboratory's CST Division Periodic Table** (<http://pearl1.lanl.gov/periodic/elements>). აღნიშნულ ვებ-გვერდებთან დაკავშირება შესაძლებელია ქიმიური ელემენტის ინფორმაციის ფანჯრის ბოლო გადასართავით **Интернет** (ინტერნეტი).

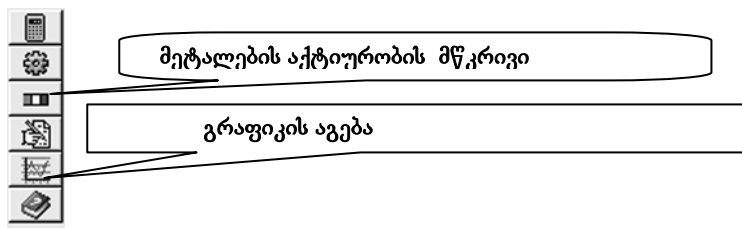
ქიმიური ელემენტის ინფორმაციის ფანჯრის ქვედა ხაზში განთავსებულია დიალოგები, რომელთა საშუალებით შესაძლებელია გამოტანილი ინფორმაციის ექსპორტირება (დისკზე შენახვა ტექსტური ფაილის სახით) და დაბეჭდვა (ნახ. 5).



ნახ. 5. დიალოგის ფანჯრის დამატებითი მართვის დიალოგები



პროგრამა **TableRus** საშუალებას იძლევა მეტალები დალაგდეს წყალბადის მიმართ აქტიურობის მიხედვით. აღნიშნული მწკრივის ეკრანზე გამოსატანად საჭიროა გავაქტიუროთ ეკრანის (ნახ. 1) ზედა მარცხენა კუთხეში განთავსებული მესამე ლილაკი (ნახ. 6). მისი გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოვა ახალი ფანჯარა, რომელზეც მეტა-



ნახ. 6. დამატებითი მმართველის ლილაკები

ლები განლაგებული იქნება მარცხნიდან მარჯვნივ აქტიუ-



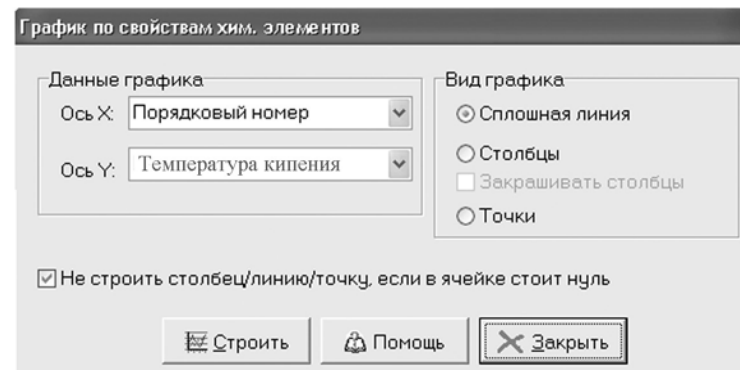
ნახ. 7. მეტალების აქტიურობის მწკრივი წყალბადის მიმართ რობის შემცირების მიხედვით (ნახ. 7).

პროგრამა **TableRus** აღჭურვილია კიდევ ერთი საინტერესო ფუნქციით. ქიმიური ელემენტების ფიზიკური პარამეტრები: ატომური მასა, რიგობრივი ნომერი, კოვალენტური რადიუსი, ელექტროუარყოფითობა, დუღილისა და ღლილის ტემპერატურები და სხვა ზემოთჩამოთვლილი სიდიდეები შესაძლებელია წარმოდგენილი იქნას გრაფიკული სახითაც. პარამეტრების გრაფიკული სახით წარმოდგენისათვის

უნდა გავაქტიუროდ გრაფიკის აგების ლილაკი (ნახ. 6). მასზე თავუნას ლილაკის ერთჯერადი დაწკაპუნებით ეკრანზე გამოდის დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 8), რომელიც შეიცავს ორ ჩამოსაშლელ ნუსხას. პირველი ნუსხა შეესაბამება აბსცისათა, ხოლო მეორე – ორდინატთა ღერძს.

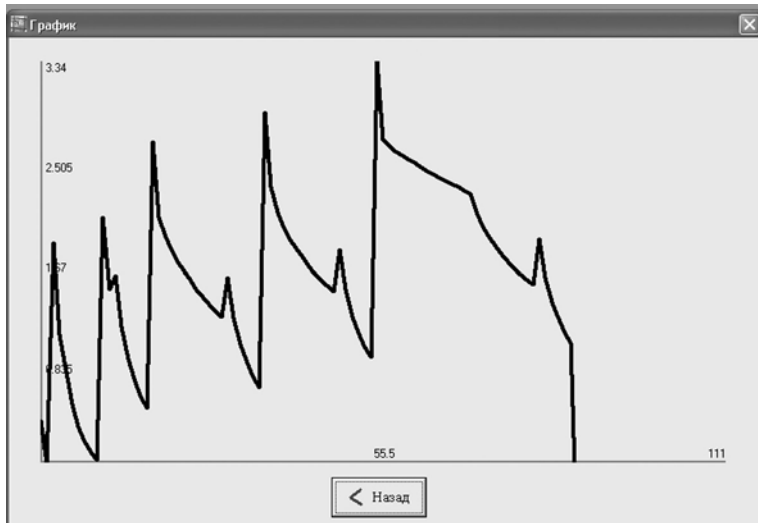
ფანჯრის მარჯვენა მხარეს მოთავსებული ჩარჩო **Вид графика** (გრაფიკის სახე) შეიცავს სელექტორს (გადასართავს), რომლის საშუალებითაც შეიძლება შეირჩეს გრაფიკის სახე. თუ გააქტიურებულია გადასართავი **Сплошная линия** (უწყვეტი ხაზი) გრაფიკი წარმოდგენილი იქნება წირის სახით, გადასართავის **Столбцы** (სვეტები) გააქტიურების შემთხვევაში გრაფიკს ექნება ნომოგრამის სახე, ხოლო თუ დამოკიდებულება გვინდა წარმოდგენილი იყოს წერტილების სახით, მაშინ აუცილებელია სელექტორის **Точки** (წერტილები) გააქტიურება.

სასურველი პარამეტრების შერჩევის შემდეგ უნდა



ნახ. 8. ქიმიური ელემენტების ფიზიკური პარამეტრების ურთიერთდამოკიდებულების გრაფიკის აგების დიალოგის ფანჯარა

გააქტიურდეს ლილაკი **Строить** (აგება) (ნახ. 8). მისი გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოვა გრაფიკის აგების მოსამზადებელი შუალედური დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც შერჩეული პარამეტრები მოცემული იქნება ცხრილის სახით. ლილაკის **Далее** (შემდეგ) გააქტიურების შემდეგ აიგება გრაფიკი, რომელზეც რეზულტატი წარმოდგენილი იქნება წირის ან წერტილების სახით.



ნახ. 9. ელემენტების ფიზიკური პარამეტრების ურთიერთდამოკიდებულების გრაფიკი

მაგალითის სახით ავაგოთ დამოკიდებულების გრაფიკი ელემენტების რიგობრივ ნომერსა და დუდილის ტემპერატურას შორის. თავუნას მარცხენა ღილაკი დავაწკაპუნოთ გრაფიკის აგების ღილაკზე (ნახ. 6). გრაფიკის აგების დიალოგის ფანჯარაზე (ნახ. 8) X-ღერძზე შევარჩიოთ რიგობრივი ნომერი (**Порядковый номер**), ხოლო Y-ღერძზე კი - დუდილის ტემპერატურა (**Температура кипения**). გრაფიკის სახის შესარჩევი ჩარჩოდან **Вид графика** (*გრაფიკის სახე*) თავუნას ღილაკის დაწკაპუნებით გავააქტიურთ გადასართავი **Сплошная линия** (*უწყვეტი ხაზი*). აღნიშნული შერჩევების შემდეგ გადავიდეთ უშუალოდ გრაფიკის აგებაზე. ამისათვის დიალოგის ფანჯარაზე გავააქტიურთ ღილაკი **Строить** (*აგება*). მასზე დაწკაპუნების შემთხვევაში გამოვა ფანჯარა ცხრილით, რომლის შესაბამისადაც აიგება გრაფიკი. გავააქტიურთ ღილაკი **Далее** (*შემდეგ*). ცხრილური დამოკიდებულება გარდაიქმნება გრაფიკად (ნახ. 9).

## 2.2. პროგრამა Chemical Thesaurus

პროგრამა **Chemical Thesaurus** წარმოადგენს შედარებით უფრო ინფორმაციულ პროგრამას ვიდრე **TableRus**. დღეისათვის ცნობილია მისი 3.1 ვერსია. მისი საინსტალაციო ფაილია **ChemThes3-1\_PC.exe**. იგი დისკზე იკავებს 21 MB მოცულობას და წარმოადგენს თვითგანშლად არქივს.

### 2.2.1. პროგრამის ინსტალაცია

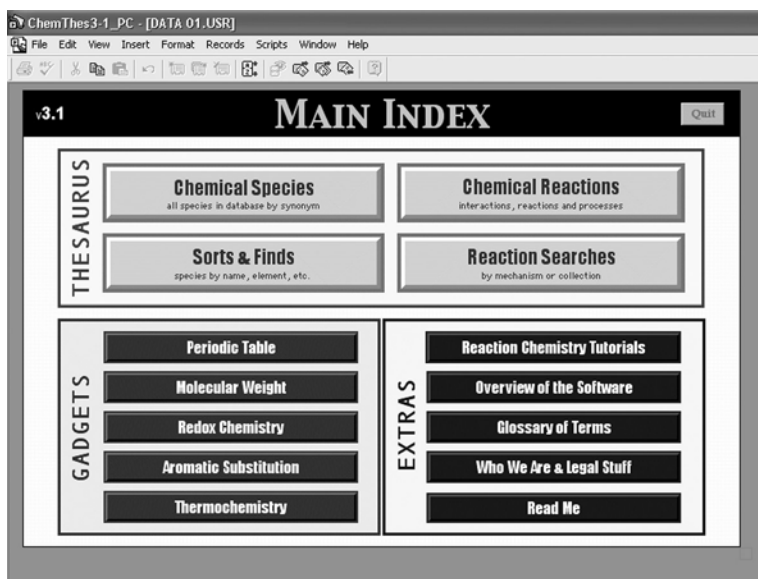
პროგრამის ინსტალაცია არ არის სტანდარტული. იგი მოითხოვს საინსტალაციო ფაილის გაშვებას, რომლის შემდეგ ადგილი აქვს შეკუმშული ფაილის გაშლას სპეციალურ კატალოგში. გაშლილი პროგრამის მოცულობა 180 MB-ს შეადგენს. გამშვები პროგრამის იარლიყის ინსტალირება Start ღილაკში ავტომატურად არ ხდება, რაც შეიძლება ამ პროგრამის ნაკლად ჩაითვალოს. პროგრამა რომ უფრო ადვილად მოსახმარი გახდეს, აუცილებელია გამშვები იარლიყის დაყენება სამუშაო მაგიდაზე ან Start-ის ღილაკში. პროგრამის იარლიყის დაყენება სამუშაო მაგიდაზე:

- სამუშაო მაგიდის თავისუფალ ადგილას დავაწკაპუნოთ თავუნას მარჯვენა ღილაკი;
- კონტექსტური მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **New** (*ახალი*) და შემდეგ **Short Cut** (*იარლიყი*);
- დიალოგის ფანჯარაში მივუთითოთ გამშვები ფაილის ზუსტი ბილიკი ან გავააქტიურთ ღილაკი **Browse** (*ძებნა*) და მოვებნოთ პროგრამის გამშვები ფაილი;
- გავააქტიროთ ღილაკი **Next** (*შემდეგი*), ხოლო შემდეგ ღილაკი **Finish** (*დასასრული*).

### 2.2.2. პროგრამის ინტერფეისი

პროგრამა **Chemical Thesaurus** განეკუთვნება მონაცემების ბაზასთან მომუშავე პროგრამის ტიპს. მისი დანიშნულებაა სპეციალურ მონაცემთა ბაზებში არსებული

ინფორმაცია მრავალმხრივი კავშირებით დააკავშიროს ერთმანეთთან. პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 10-ზე. ეკრანზე დამონტაჟებული მმართველის ღილაკები დაყოფილია სამ ჯგუფად და შემოსაზღვრულია ცალკეული ჩარჩოებით. ზედა ჩარჩო წარმოადგენს ძირითად საძიებელს (**Thesaurus**). იგი მოიცავს ოთხ ღილაკს **Chemical Species** (*ქიმიური ნაწილაკები*), **Sorts & Finds** (*სორტირება და მოძიება*), **Chemical Reactions** (*ქიმიური რეაქციები*), **Reaction Searchers** (*რეაქციის მაძიებლები*). შემდეგი ჩარჩო **Gadgets** (*სასარგებლო მოწყობილობები*) აერთიანებს დამხმარე მოწყობილობების ღილაკებს, რომელთა საშუალებით შეიძლება პერიოდული ტაბულის გამოძახება, მოლეკულური მასის გაანგარიშება, ელემენტების რედოქსპოტენციალების ნახვა, არომატულ ბირთვში ელექტროფილური ჩანაცვლების ორიენტაციის განსაზღვრა და ზოგიერთი რეაქციის თერმოქიმიური სიდიდეებს მოძიება. მესამე ჩარჩოში **Extras** (*დამატებითი მოწყობილობები*) გაერთიანებული

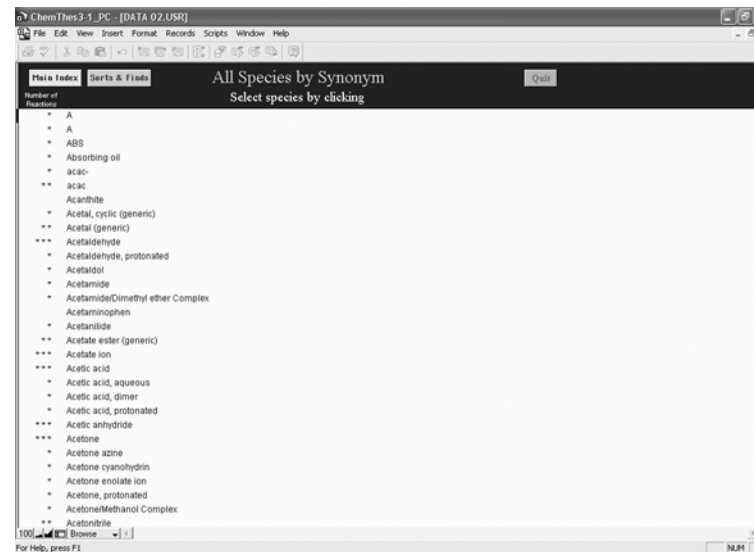


ნახ. 10. პროგრამა Chemical Thesaurus-ის ინტერფეისი

ღილაკები ემსახურება დამატებითი ინფორმაციის მიღებას ქიმიური რეაქციის ტიპებზე, თეორიული ქიმიის ზოგიერთ ძირითად საკითხებზე და საკუთრივ პროგრამაზე.

### 2.2.3. ქიმიური ნაერთებისა და მათი თვისებების მოძიება სინონიმების მიხედვით

ქიმიური ლიტერატურის გაცნობისას, განსაკუთრებით კი თუ იგი ძველ მასალას მოიცავს, ხშირად ვაწყდებით პრობლემას ნაერთებისა და ნაწილაკების ტრივიალურ დასახელებასთან. დღეისათვის მრავალი ტრივიალური დასახელება IUPAC-ის საერთაშორისო სისტემის მიერ არა აღიარებული და აღარ გამოიყენება. ამიტომ, მათ თანამედროვე ლიტერატურაში ვერ ან ნაკლებად შევხვდებით. ისტორიული და ტრივიალური დასახელებების მოძიებისათვის კარგ დახმარებას გააკვიწვეს პროგრამა **Chemical Thesaurus**. ამისათვის საკმარისია გავააქტიუროთ ღილაკი **Chemical Species** (ქიმიური ნაწილაკები). ძირითადი პროგრამის ფანჯარა დაიხურება და მის ნაცვლად



ნახ. 11. ქიმიური ნაწილაკების სინონიმების მონაცემთა ბაზა

გაიხსნება ახალი ფანჯარა (ნახ. 11).

სინონიმები ჩამოთვლილია ანბანის მიხედვით. თითოეული სინონიმის დასახელების წინ შეიძლება მოცემული იყოს ვარსკვლავები ერთიდან სამამდე. მათი არსებობა და რაოდენობა მიუთითებს ნაწილაკის შესახებ მონაცემთა ბაზაში არსებული რეაქციების რაოდენობაზე.

პროგრამა მარტო ქიმიური სინონიმების ჩამოთვლით არ შემოიფარგლება. მას გააჩნია საკმაოდ მდიდარი ინფორმაცია თითოეულ ჩანაწერზე. ნაწილაკის დასახელებაზე თავუნას ლილაკის დაწკაპუნებით გაიხსნება ახალი ფანჯარა, რომელიც დათმობილი აქვს მხოლოდ აღნიშნული ნაწილაკის შესახებ ინფორმაციას (ნახ. 12).

ეკრანზე მარცხენა ზედა კუთხეში მოცემულია საძიებელი ნაერთის სტრუქტურული ფორმულა და მისი შესაძლო ყველა დასახელება. მის ქვემოთ მოყვანილი იქნება ბრუტო ფორმულა, მოლეკულური მასა, ლლობისა და დუდილის ტემპერატურა, წყალში და ორგანულ გამხსნელებში ხსნადობა.

ChemThes3-1\_PC - [DATA 03.USR]

File Edit View Insert Format Records Scripts Window Help

Main Index Synonyms Sorts & Finds Species Data Page Quit

Acetic acid  
Ethanoic acid  
Glacial acetic acid

CC(=O)O

Species is a real, long lived, electronically neutral reagent chemical

$C_2 H_4 O_2$

QFW 60.05  
mp 16.2  
bp 117.0  
density 1.049

Solubility in water @ 25°C infinitely miscible  
Solubility in organic solvents infinitely miscible

22 Processes form Acetic acid as a product or byproduct

24 Processes utilise Acetic acid as a substrate or reagent

Defined as and Search with respect to:

- Alkyl, -CH3 (generic)
- Brosted acid, hydroxy (generic)
- Carboxylic acid (generic)
- Molecular material (generic)
- Natural Product
- Type 03 Lewis Acid/Base Complex (super-generic)
- Type 15 Lewis Acid/Base Complex (super-generic)

ნახ. 12. ნაწილაკების შესახებ სრული ინფორმაციის ფანჯარა

ეკრანის მარჯვენა მხარეს მოთავსებულია რამოდენიმე ლილაკი. ზედა მარჯვენა ლილაკის გააქტიურებით შესაძლებელია საძიებელი სტრუქტურის მიღების რეაქციების დათვთალიერება. შესაძლო მეთოდების რაოდენობა თვით ლილაკზეც არის მითითებული. თუ გვინტერესებს საძიებელი ნაერთის ქიმიური თვისებები, ამისათვის უნდა გავააქტიუროთ ზემოდან მეორე (იგივე ზომის) ლილაკი (ნახ. 13). ამ შემთხვევაშიც, თვით ლილაკზე არის მითითებული მონაცემთა ბაზაში არსებული რეაქციების (ქიმიური თვისებების) რაოდენობა.

დანარჩენი მარჯვენა მოთავსებული ლილაკები ემსახურებიან ისეთი სახის დამატებითი ინფორმაციის მოწოდებას შერჩეული ნაერთის შესახებ, როგორცაა წარმოშობა (ორგანული, ბუნებრივი, არაორგანული), ელექტრონული აღნაგობა, იონების წარმოქმნის შესაძლებლობა და ფორმა,

ChemThes3-1\_PC - [DATA 07.USR]

File Edit View Insert Format Records Scripts Window Help

Main Index Select a reaction by clicking on the reaction. Quit

Substrate 1st Reagent 1st Product 2nd Product

Click the button to sort by... THESE SORTS ARE A BIT SLOW

Acetal, cyclic (generic) Water Aldehyde (generic) Ethylene glycol  
C1OC(R)OC1 H2O H+ R-CHO HO-CH2-CH2-OH

Acetal (generic) Water Aldehyde (generic) Alcohol (generic)  
RO-C(R)(OR)-H H2O H+/H2O R-CHO R-OH

Acetaldehyde 1,3-Butadiene, s-trans  
CC=O  $\rightleftharpoons$  C=CC=C

Acetaldehyde Acetic anhydride Vinyl acetate Acetic acid  
CC=O CC(=O)OC(=O)C  $\rightarrow$  CC(=O)OC CC(=O)O

Acetaldehyde Aluminium oxide 2-Methylpyridine 4-Methylpyridine  
CC=O Al2O3  $\rightarrow$  CC1=CC=CC=C1N CC1=CC=CC=C1N

ნახ. 13. ქიმიური თვისებების ფანჯარა

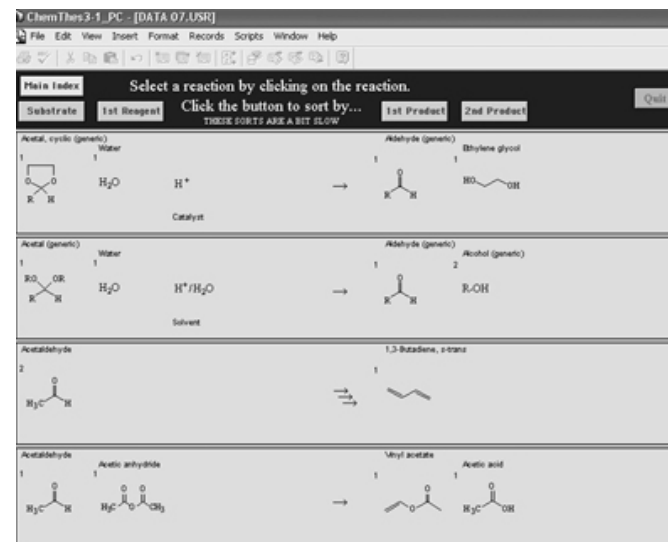
მდგრადობა, თერმოდინამიკური პარამეტრები და სხვა.  
 აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ მარჯვნივ მოთავსებული ღილაკების რაოდენობა არ არის სტანდარტული და იგი დამოკიდებულია მონაცემთა ბაზაში არსებული ინფორმაციის რაოდენობასა და გვარობაზე.

### 2.2.4. ქიმიური რეაქციების მონაცემთა ბაზა

პროგრამა **Chemical Thesaurus** საკმაოდ დიდ ინფორმაციას მოიცავს ქიმიურ რეაქციებზე. რეაქციების ჩამონათვალის ეკრანზე გამოტანა შესაძლებელია ღილაკის **Chemical Reactions** (ქიმიური რეაქციები) გააქტიურებით (ნახ. 10). რეაქციის მორეაგირე კომპონენტები დაყოფილია სუბსტრატად, პირველ რეაგენტად, პირველ პროდუქტად და მეორე პროდუქტად. რეაქციის კომპონენტების ამგვარი კლასიფიკაცია ემსახურება რეაქციების ძებნის სრულყოფას. კერძოდ, შესაძლებელია რეაქციების ნუსხა ანბანის მიხედვით დალაგდეს სუბსტრატის, პირველი რეაგენტის, პირველი და მეორე პროდუქტის მიხედვით. ამისათვის საჭიროა გააქტიურდეს შესაბამისი ღილაკი, რომელიც მოცემულია ნუსხის თავში (ნახ. 14).

პროგრამა იძლევა საშუალებას დაწვრილებით ინფორმაცია მივიღოთ აგრეთვე საკუთრივ ცალკეულ რეაქციებზე. ამისათვის საჭიროა დავაწკაპუნოთ თვით რეაქციის ჩანაწერზე. ეკრანზე გამოვა ახალი ფანჯრა, სადაც მოთხრობილი იქნება რეაქციის მექანიზმის შესახებ, სინთეზის მეთოდოლოგიაზე და ა.შ.

ქიმიური რეაქციების ძიება, გარდა რეაქციაში მონაწილე კომპონენტებისა, შესაძლებელია რეაქციის ტიპების (მიერთება, ჩანაცვლება, ელიმინირება და ა.შ.), რეაქციის მექანიზმების მიხედვით. ამისათვის უნდა გააქტიურდეს ღილაკი **List** (ნუსხა), რომელიც რეაქციების ნუსხის ზემოთ არის მოთავსებული.



ნახ. 14. ქიმიური რეაქციების ნუსხა

### 2.2.5. ზოგადი სახის ქიმიური ინფორმაციის ძიება Chemical Thesaurus-ის მონაცემთა ბაზაში

პროგრამა **Chemical Thesaurus** აღჭურვილია ძიების მძლავრი სისტემით. ძიების რეჟიმის გააქტიურებისათვის უნდა დავაწკაპუნოთ ღილაკზე **Sorts & Finds** (სორტირება და მოძებნა) (ნახ. 10).

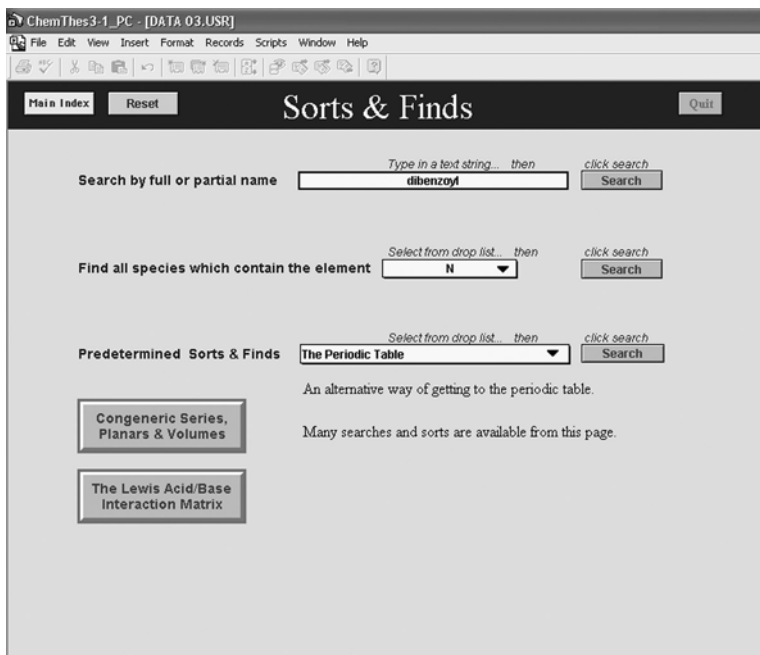
ეკრანზე გამოვა ახალი ფანჯრა (ნახ. 15), რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია მონაცემთა ბაზაში არსებული ტერმინის (ტექსტის), ქიმიური ელემენტის, კლასის, სპექტრის და ა.შ. მრავალმხრივი ძებნა.

როგორც სურათიდან ჩანს, ეკრანზე მოცემულია სამი სახის ძიების მინდორი (ისინი ყვითლად არიან შეფერილნი).

პირველი მინდორი **Search by full or partial name** (სრული ან ნაწილობრივი სახელის მიხედვით ძებნა) ემსახურება ძიებას სრული ან ნაწილობრივ დასახელების მიხედვით. მასში ჩაწერილი ტექსტის მიხედვით კომპიუტერი ეკრანზე გამოიტანს ყველა სახის ინფორმაციას, რომელშიც კი საძიებო ტექსტი ფიგურირებს. მაგალითად, ვთქვათ შევიტა-

ნეთ ტექსტი „Benz“. ძიების შედეგად მანქანა გამოიტანს ინფორმაციას, რომელიც მოიცავს შემდეგ სიტყვებს: Benzo, Benzene, Benzyl, და ა.შ.

ძიების მეორე მინდვრის **Find all species which contain the element** (ყველა ნაწილაკის პოვნა, რომელიც შეიცავს ელემენტს) საშუალებით შესაძლებელია მონაცემთა ბაზაში ინფორმაციის მოძიება ელემენტის დასახელების საშუალებით. მაგალითად, თუ ყვითელი ფერის მინდორზე თავუნას მარცხენა ღილაკს დავაჭერთ, ჩამოიშლება ფანჯარა, რომელშიც შეგვიძლია ავირჩიოთ ელემენტი (ნახ. 15).



ნახ. 15. ინფორმაციის ძიების ფანჯარა

მაგალითად, შევარჩიოთ ელემენტი ტიტანი. გავააქტიურთ ძიების დაწყების ღილაკი **Search** (ძებნა), რომელიც მის მარჯვნივ არის მოთავსებული. ძიების შედეგად

ეკრანზე გამოვა ის ინფორმაცია, რომელშიც ფიგურირებს ელემენტი ტიტანი.

მესამე მინდორი უფრო ფართო დანიშნულების ძიების საშუალებას იძლევა. ეს მინდორიც ჩამოსაშლელ ნუსხას წარმოადგენს. მისი საშუალებით შესაძლებელია შემდეგი ჯგუფური (თემატური) ტიპის ძიების განხორციელება მონაცემთა ბაზაში:

- ყველა ნაერთის სინონიმი (სტრუქტურების გარეშე) - All Species by Synonym (no structure);
- ყველა ნაერთის სინონიმი (სტრუქტურების ჩათვლით) - All Species by Synonym;
- ნაერთების რეალური დასახელება – Real Species by Name;
- სპექტრები - Spectra;
- ორგანული ნაერთების მუავიანობა (ბრენსტედის პრინციპის მიხედვით – Brensted Acids);
- მინერალები - Minerals;
- პერიოდული ტაბულა – Periodic Table;
- და სხვა.

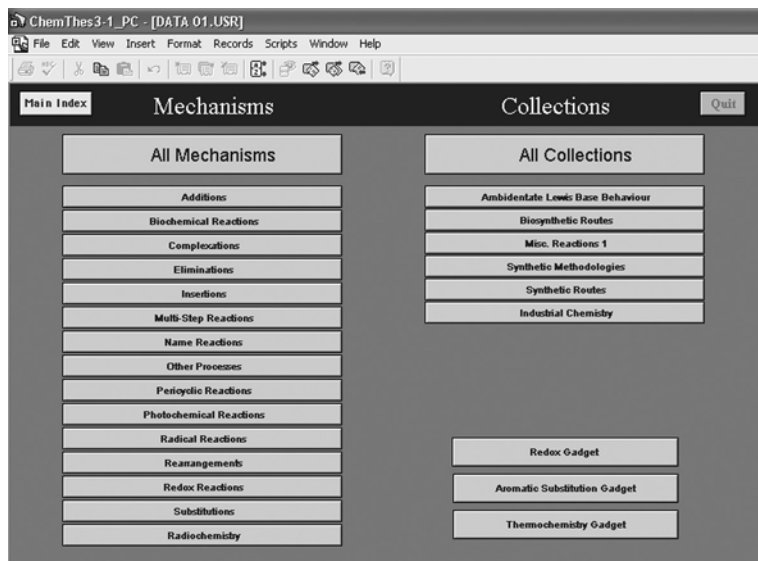
## 2.2.6. ქიმიური რეაქციების ძიება ტიპებისა და მექანიზმების მიხედვით

პროგრამის ინტერფეისზე ღილაკი **Reaction Searchers** (რეაქციების ძიება) (ნახ. 10) საშუალებას გვაძლევს ძიება ვაწარმოოთ რეაქციის ტიპების მიხედვით (ნახ. 16).

როგორც ზემოთმოყვანილი სურათიდან ჩანს, ქიმიური რეაქციის თითოეულ ტიპს შეესაბამება ცალკეული ღილაკი. მოცემული ქიმიური რეაქციები გაერთიანებულია ორ დიდ ჯგუფში. პირველ ჯგუფში მოცემულია, რეაქციები მექანიზმის მიხედვით, ხოლო მეორე ჯგუფში რეაქციები დალაგებულია კატეგორიებისა და ტიპების მიხედვით.

პირველ ჯგუფში შემავალი რეაქციები დაყოფილია მექანიზმის მიხედვით. აქ შეიძლება მოვიძიოთ შემდეგი რეაქციები:

- მიერთების (Additions)
- ბიოქიმიური (BioChemical Reactions)
- კომპლექსწარმოქმნის (Complexations)
- ელიმინირების (Elimination)
- ჩართვის (Insertion)
- მრავალსაფეხურიანი რეაქციები (Multi-step reactions)
- სახელობითი რეაქციები (Name Reactions)
- პერიციკლური რეაქციები (Pericyclic Reactions)
- ფოტოქიმიური (Photochemical Reactions)
- რადიკალური (Radical Reactions)
- გადაჯგუფების (Rearrangements)
- რედოქს რეაქციები (Redox Reactions)
- ჩანაცვლების (Substitutions)
- რადიო ქიმია (Radiochemistry)



ნახ. 16. ქიმიური რეაქციების ძიება ტიპების მიხედვით

მეორე ჯგუფში გაწვევრიანებული რეაქციები სახელობითი რეაქციებია. აქვე შეგვიძლია მოვძებნოთ რეაქციები სინთეზის მეთოდოლოგიის (ჯაჭვის დაგრძელება-დამოკლება, და სხვა) მიხედვით, ქიმიური სამრეწველო რეაქციები და სხვა.

თითოეული ლილაკის გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოდის ახალი ლილაკების შემცველი ფანჯარა, რომელშიც ქიმიური რეაქციები უფრო ვიწრო კლასიფიკაციის მიხედვითაა დაკატალოგებული. მაგალითად ლილაკის **Substitution (ჩანაცვლება)** არჩევის შემდეგ ჩვენ გვექნება დამატებითი არჩევანის გაკეთების საშუალება. ანუ პროგრამა მოგვთხოვს ავირჩიოთ შემდეგი ჩანაცვლების რეაქციები: რადიკალური, ელექტროფილური, ნუკლეოფილური და სხვა სახის ჩანაცვლების რეაქციები.

თვით ქიმიური რეაქციის მექანიზმები ვიზუალურად ადვილად აღსაქმელადაა წარმოდგენილი.

ქიმიური რეაქციების, როგორც ცალკე ქიმიური დისციპლინის მოკლე მიმოხილვა საკმაოდ ინფორმაციულადაა გაფორმებული პროგრამა **Chemical Thesaurus**-ში. მოგზაურობა აღნიშნული დისციპლინის ძირითად თავებში შესაძლებელია ლილაკით **Reaction Chemistry Tutorials (ქიმიური რეაქციების სახელმძღვანელო)**. მასზე თავუნას ლილაკის დაწკაპუნებით ეკრანზე გამოვა მიმოხილვითი სარჩევი, რომლიდანაც შესაძლებლობა გვაქვს მოკლედ, მაგრამ საკმაოდ ინფორმაციულად გავეცნოთ თვით დისციპლინის დარგს, ელექტრონული და მოლეკულური ორბიტალების თეორიას, ელემენტების ელექტროუარყოფითობის ფენომენს, რედოქს ქიმიას, ფოტოქიმიას, ლუისის მჟავა/ფუძურ ქიმიას, რადიკალებისა და ბირადიკალების ქიმიას.

### 3. ორგანოზომილებიანი ბრაზიკული პროგრამები (2D ბრაზიკა)

გამოყენების მხრივ ლიდერობენ გრაფიკული ქიმიური პროგრამები. მათი საშუალებით წარმოებს ორგანოზომილებიანი ქიმიური სტრუქტურების აგება და ტრანსფორმაციები. ორგანოზომილებიანი ქიმიურ სტრუქტურები კი თავის მხრივ აქტიურად გამოიყენება ქიმიური ტექსტების (წიგნები, სტატიები, სასტენდო მასალები, ბუკლეტები და სხვა) გაფორმებისას. დღეისათვის შექმნილია ორგანოზომილებიანი გრაფიკის მრავალი პროგრამა, რომელთაგანაც ყველაზე დიდი პოპულარობით სარგებლობს ChemDraw, ChemSketch, ChemWindow, ISIS Draw.

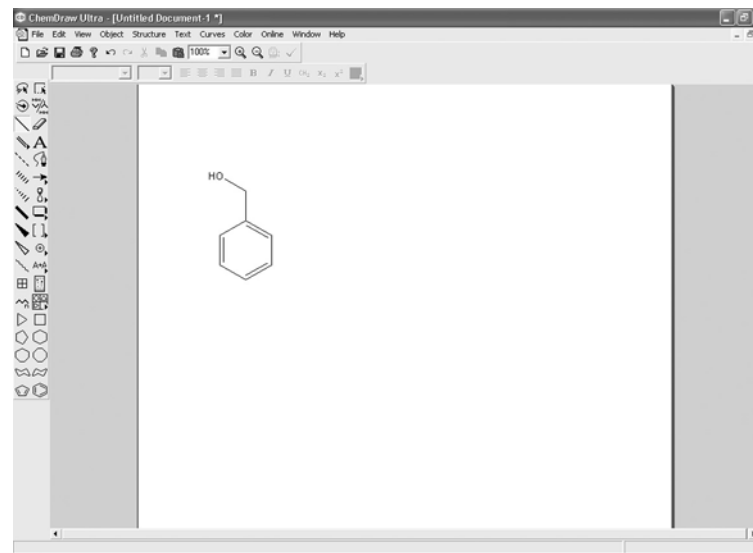
ჩამოთვლილი პროგრამების ინტერფეისი და მოქმედების მეთოდი მნიშვნელოვნად განსხვავდება ერთმანეთისაგან, თუმცა ისინი ერთ საერთო პრინციპზეა აგებული. მათი დანიშნულებაა ქიმიური სტრუქტურების აგება მზა ქიმიური ელემენტებით (მოწყობილობებით). ამისათვის ყველა პროგრამას აქვს ისეთი მზა ელემენტები, როგორცაა ქიმიური ბმა, ქიმიური ელემენტების ტაბულა (საიდანაც შესაძლებელია ელემენტის არჩევა) და მოლეკულების ფრაგმენტებისა და რადიკალების ბაზა.

გარდა ამისა, აღნიშნული პროგრამები კლასიკური გრაფიკული პროგრამებისაგან (PhotoShop, Corel Draw) „ქიმიის ცონდითაც“ გამოირჩევიან. მათ მიერ აგებული სტრუქტურები არ არის გეომეტრიული ფიგურები ან ნახატები. მაგალითად, ქიმიურ პროგრამაში დახატული კვადრატია არ არის გეომეტრიული ფიგურა. პროგრამა მას უყურებს, როგორც ციკლობუტანს, ანუ ერთმანეთთან დაკავშირებულ ოთხ-CH<sub>2</sub>-ჯგუფს.

### 3.1. სტრუქტურების აგება პროგრამა CHEMDRAW-ში

პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 17-ზე. საშუალო სივრცის მარცხნივ მოცემულია ძირითადი მოწყობილობების პანელი, რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია ავირჩიოთ ქიმიური ბმის ხატვის, საშლელის, ქიმიური ელემენტების ჩართვის, ობიექტის მონიშვნის და ა.შ. რეჟიმები.

სტრუქტურის აგებისათვის მთავარ იარაღს წარმოადგენს ქიმიური ბმის ღილაკი (მარცხენა სვეტში ზემოდან



ნახ. 17. პროგრამა ChemDraw-ის ინტერფეისი

მესამე ღილაკი). იგი სურათზე ისრით არის აღნიშნული (ნახ. 18). სანამ უშუალოდ სტრუქტურის აგებას შევუდგებოდეთ, აუცილებელია ფიქსირებული ქიმიური ბმისა და ფიქსირებული ბმის კუთხის რეჟიმების ჩართვა. აღნიშნული რეჟიმების ჩართვის შემთხვევაში, სტრუქტურის აგებისას ყველა ბმა და ბმის კუთხე ერთნაირი იქნება, რაც სტრუქტურას უფრო ესტეტიკურ სახეს მიანიჭებს. მათი ჩართვა



წარმოებს **Object** (ობიექტი) მენიუდან. თუ ბრძანებების **Fixd Length** (ფიქსირებული სიგრძე) და **Fixd Angles** (ფიქსირებული კუთხე) წინ მონიშვნის სიმბოლო არ არის, როგორც ქვემოთ მოცემულ ნახ. 19-ზე არის ნაჩვენები, მაშინ საჭიროა თიოეულზე თავუნას მარცხენა ღილაკის დაწკაპუნება.



ნახ. 18. ქიმიური ბმის აგების ღილაკი (ნაჩვენებია ისრით)

კურსორი სამუშაო სივრცეში შეტანისას იღებს პატარა ჯვრის სახეს. სტრუქტურის აგება იწყება საწყისი ერთი ბმის აგებით. ამისათვის დავაჭიროთ თავუნას მარცხენა



ნახ. 19. Object მენიუ. ჩართულია ფიქსირებული ბმის სიგრძისა და ფიქსირებული ბმის კუთხის რეჟიმი

ღილაკს და გავაცუროთ დაახლოების 30°-იანი კუთხით ზევით და მარჯვნივ. ეკრანზე გამოჩნდება ხაზი (ქიმიური ბმა), რომელიც გარკვეული სიგრძის მიღწევის შემდეგ შეწყვეტს სიგრძეში ზრდას.



გავანთავისუფლოთ თავუნას ღილაკი. ეკრანზე დარჩება ხაზი, რომელიც რეალურად წარმოადგენს ეთანის მოლეკულას. ქიმიური ბმის წვეროებში ყოველთვის იგულის-

ხმება წყალბადატომებით შევსებული ნახშირბადატომი. ჩონჩხის გაგძელებისათვის კურსორი მივიყვანოთ აგებული ქიმიური ბმის ერთ-ერთ ბოლოში. აღნიშნული ატომი მონიშნება პატარა შავი კვადრატით:



დავაწკაპუნოთ თავუნას მარცხენა ღილაკზე. აიგება დამატებითი ბმა 120°-იანი კუთხით.



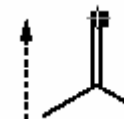
დავუბრუნდეთ წინა ნახშირბადატომს.



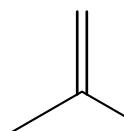
დავაწვეთ მარცხენა ღილაკს და გავაცუროთ ვერტიკალურად ზევით. აიგება განშტოებული ჩონჩხი. დავუბრუნდეთ ისევ წინა ნახშირბადატომს. მიიღება იზობუტანის მოლეკულა.



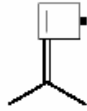
კვლავ დავაჭიროთ თავუნას მარცხენა ღილაკს და გავაცუროთ ვერტიკალურად ზევით სანამ არ მონიშნება წინა ოპერაციისას აგებული ბმის მეორე ბოლო:



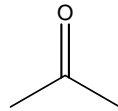
გავანთავისუფლოთ თავუნას ღილაკი. აგებულ სტრუქტურას ექნება შემდეგი სახე. იგი წარმოადგენს იზობუტენის მოლეკულას:



როგორც უკვე იყო აღნიშნული, ბმების ბოლოებში იგულისხმება ნახშირბადატომები. ორმაგი ბმის ზევით მდებარე ნახშირბადატომი შევცვალოთ ჟანგბადის ატომით. ამისათვის კურსორი მივიყვანოთ აღნიშნულ წერტილში და დავაწკაპუნოთ ორჯერ სწრაფად. ეკრანზე გამოვა ტექსტის უჯრა:



კლავიატურის საშუალებით ავკრიფოთ მაღალი რეგისტრის „O“ (Shift-O). აგებული სტრუქტურა გარდაიქმნება აცეტონის მოლეკულაში.

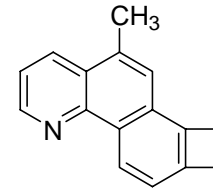


ციკლური ნაერთების სტრუქტურების აგებისათვის პროგრამას აქვს სპეციალური ლილაკები, რომელთა საშუალებითაც შესაძლებელია 3-, 4-, 5-, 6-წევრიანი ციკლების აგება ერთი დაწკაპუნებით. მომხმარებელს აქვს საშუალება ციკლოჰექსანი აირჩიოს სავარძლისა და ნავის კონფორმაციების სახითაც. საკუთარი ლილაკი გააჩნია არომატულ ბირთვსაც (ნახ. 20).



ნახ. 20. ციკლური სტრუქტურების აგების ლილაკები

მაგალითად ავაგოთ შემდეგი სტრუქტურა:



1. ავირჩიოთ არომატული სტრუქტურის შესაბამისი ლილაკი (ნახ. 20). კურსორი მიიღებს მცირე ზომის მუქი წერტილის მქონე ექვსკუთხედის სახეს.



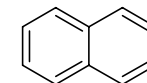
2. დავაწკაპუნოთ ეკრანზე ჩვენთვის სასურველ ლილაკს. აიგება ბენზოლის მოლეკულა. კურსორს კი ისევ ექნება ექვსკუთხედის სახე.



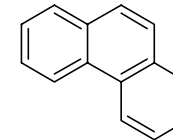
3. კურსორი მივუახლოვოთ ბენზოლის მარჯვენა ვერტიკალურ ბმას მის მონიშვნამდე:



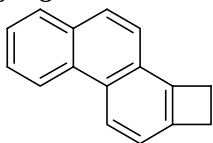
4. დავაწკაპუნოთ. მოლეკულა მიიღებს ნაფთალინის სახეს:



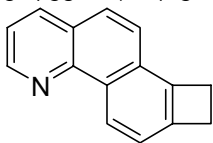
5. ანალოგიურად მოვიქცეთ კიდევ ერთი ფენილის ფრაგმენტის მისაშენებლად.



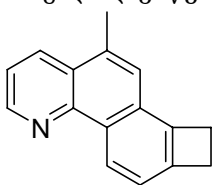
6. ავირჩიოთ ციკლობუტანის ღილაკი და ქვედა ბენზოლის მარჯვენა ვერტიკალური ბმის გააქტიურების შემდეგ დავაწკაპუნოთ:



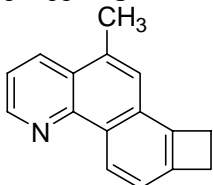
7. ერთ-ერთი არმატული ბირთვი შევცვალოთ ჰეტერო-არომატულად. ამისათვის კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ატომზე და მისი მონიშვნის შემდეგ კლავიატურაზე დავაწკაპუნოთ „N“:



8. ჩავანაცვლოთ მეთილის რადიკალი. ავირჩიოთ ქიმიური ბმის აგების რეჟიმი (როგორც წინა მაგალითში იყო ნაჩვენები). კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ნახშირბადატომზე და დავაწკაპუნოთ.



9. თუ გვინდა, რომ მეთილის რადიკალში ჩანდეს ნახშირბად და წყალბად ატომები, მაშინ კურსორი მივიყვანოთ ახალი ქიმიური ბმის ზედა ბოლოში და კლავიატურაზე ავკრიფოთ „C“:

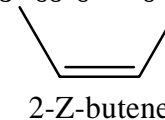


### 3.1.1. სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით

პროგრამის ChemDraw 8.00 ვერსია საშუალებას იძლევა ნაერთის სტრუქტურა აგებულ იქნას დასახელების მიხედვით. ამისათვის უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Convert Name to Structure** (დასახელების სტრუქტურაში გარდაქმნა) მენიუდან **Structure** (სტრუქტურა). აღნიშნული ბრძანების გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოვა დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც ნაერთის დასახელება ინგლისურ ენაზე IUPAC-ის პრინციპების მიხედვით უნდა შეტანილი. შესაძლებელია სიმბოლოების „(“, „)“, „[“, „]“, „{“, „}“, გამოყენება. ასევე შესაძლებელია E და Z კონფიგურაციის მითითება. მაგალითად ავაგოთ 2-Z-ბუტენის სტრუქტურული ფორმულა:

1. გავუშვათ პროგრამა ChemDraw
2. გავააქტიუროთ ბრძანება **Convert Name to Structure** (დასახელების სტრუქტურაში გარდაქმნა), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Structure** (სტრუქტურა)\*
3. დიალოგის ფანჯარაში ჩავწეროთ ტექსტი 2-Z-butene
4. თუ გვინდა რომ მოდელის ფანჯარაში სტრუქტურის აგების შემდეგ მის ქვეშ დაიწეროს ნაერთის დასახელება, მაშინ მოვნიშნოთ მონიშვნის უჯრა **Paste name below structure** (სახელის ჩაწება სტრუქტურის ქვეშ). წინააღმდეგ შემთხვევაში გავაუქმოთ მონიშვნის ნიშანი.
5. გავააქტიუროთ ღილაკი Ok

მიღებულ შედეგს ექნება შემდეგი სახე:



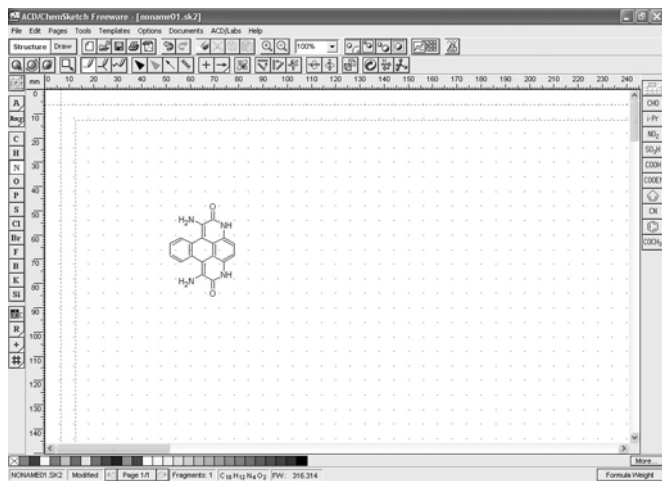
\* ანალოგიური ეფექტი ექნება Ctkl+Shift+N ღილაკების კომბინაციის დაჭერას.

### 3.2. სტრუქტურების აგება პროგრამა CHEMSKETCH-ის გამოყენებით

ორგანოზომილებიანი სტრუქტურების აგების კიდევ ერთ მძლავრ საშუალებას წარმოადგენს პროგრამა ChemSketch. იგი შედის პროგრამულ პაკეტში ACD Labs. ინტერნეტიდან შესაძლებელია მისი მერვე ვერსიის თავისუფალი გადმოწერა მისამართიდან: [www.acdlabs.com](http://www.acdlabs.com). მისი საინსტალაციო ფაილის მოცულობაა 7896 KB. იგი თავსებადია Windows 95/XP ვერსიებთან.

პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 21–ზე.

პროგრამას აქვს სტრუქტურის აგებისა (Structure) და ხატვის (Draw) რეჟიმი. მათი გადართვა წარმოებს ეკრანის ზედა მარცხენა კუთხეში მოთავსებული ღილაკებით (ნახ. 22).



ნახ. 21. პროგრამა ChemSketch-ის ინტერფეისი



ნახ. 22 სტრუქტურის აგებისა (Structure) და ხატვის (Draw) რეჟიმების გადასართავი ღილაკები

სტრუქტურის აგების დაწყების წინ აუცილებელია პროგრამის გადართვა სტრუქტურის აგების რეჟიმზე. პროგრამის მარცხენა კიდესთან მოთავსებულია ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრა. მასში ვერტიკალურად ჩამოთვლილია ძირითადი (შედარებით ხშირად საჭირო) ელემენტები: C, H, N, O, Cl, Br... თუ ელემენტი არ არის მოცემული ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრაზე, მაშინ მისი გამოძახება შესაძლებელია პერიოდული ტაბულის ღილაკით, რომელიც აღნიშნული პალიტრის თავზეა მოთავსებული (ნახ. 23). პერიოდულ ტაბულაში შერჩეული ელემენტი თავსდება ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრაზე.



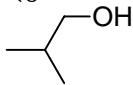
ნახ. 23 პერიოდული ტაბულის ღილაკი

სტრუქტურის აგება იწყება ელემენტის შერჩევით და ეკრანზე თავუნას ღილაკის დაწკაპუნებით.

1. შევარჩიოთ ელემენტი C და დავაწკაპუნოთ თავისუფალ სივრცეზე. დაიხატება მეთანის CH<sub>4</sub>-ის მოლეკულა.
2. კურსორი მივიყვანოთ ნახშირბადის ატომზე და ხელახლა დავაწკაპუნოთ. CH<sub>4</sub>-ს მიემატება ერთი მეთილის ჯგუფი. ამასთან პირველი ნახშირბადის ვალენტობა შესწორდება – ერთი წყალბადი დააკლდება. ამასთანავე, ეკრანიდან შესაძლებელია გაქრეს ნახშირბად- და წყალბადატომები და სტრუქტურა მხოლოდ ბმების სახით იყოს გამოსახული.
3. კვლავ დავაწკაპუნოთ კურსორი ერთ-ერთ ნახშირბადზე. მეთანის მოლეკულა გადაიქცევა პროპანის მოლეკულად, რომელიც შემდეგნაირი ტექნიკით იქნება გამოსახული.
4. მივიყვანოთ კურსორი შუა ნახშირბადზე და დავაწკაპუნოთ. მოლეკულა გადაიქცევა იზობუტანად.

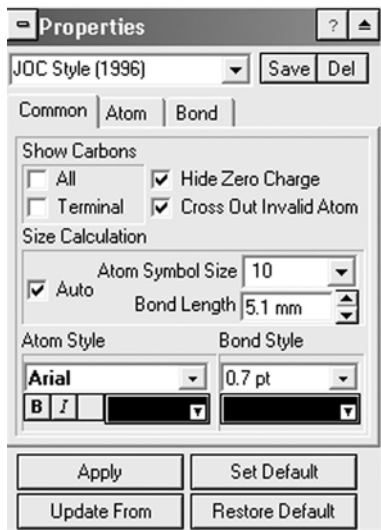


5. ერთ-ერთ განაპირა ნახშირბადატომზე ჩავანაცვლოთ ჰიდროქსილის ჯგუფი. ამისათვის ელემენტების სწრაფი მიწვდომის პალიტრიდან ავირჩიოთ ჟანგბადის ატომი. კურსორი მივიყვანოთ აგებული სტრუქტურის ერთ-ერთ განაპირა ნახშირბადატომთან, დავაჭიროთ მარცხენა ღილაკს და კურსორი გავაცუროთ რაიმე კუთხით. გაიჭიმება დამატებითი ბმა. თავუნას ღილაკის განთავისუფლების შემდეგ ბმა ეკრანზე დაფიქსირდება და მოლეკულას ჩაენაცვლება OH-ჯგუფი.



თუ სტრუქტურაზე გვინდა ყველა ატომი იყოს გამოსახული, მაშინ საჭიროა სტრუქტურების თვისებების მენიუდან მიეცეს შესაბამისი ბრძანებები.

1. გამოვიძახოთ **Structure Properties** (სტრუქტურის თვისებები) მუნიუდან **Tools** (მოწყობილობები).




ნახ. 24. სტრუქტურების თვისებების დიალოგის ფანჯარა

2. გავააქტიუროთ გადასართავი **Common** (ძირითადი) (ნახ. 24)

3. თუ მხოლოდ ტერმინალური ნახშირბადატომების ჩვენება გვინდა, ჩავრთოთ ჩასართავი **Terminal** (ტერმინალური, განაპირა)

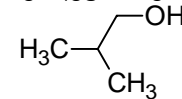
4. გადავიდეთ მონიშვნის (სელექციის) რეჟიმში

ღილაკზე  დაწკაპუნებით.

5. თავუნას მარცხენა ღილაკზე თითის დაჭერით გავაცუროთ იგი დია-

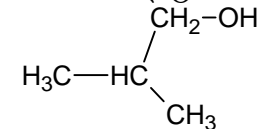
გონალურად ისე, რომ პუქტირით გამოსახულ მართკუთხედში მოხვდეს მთელი სტრუქტურა. მონიშნულ სტრუქტურაზე პატარა კვადრატები გაჩნდება, რაც მიუთითებს მის მონიშნულ ფრაგმენტს.

6. გავააქტიუროთ ღილაკი **Apply** (მიანიჭე) (ნახ. 24). სტრუქტურა მიიღებს შემდეგ სახეს



7. მოვნიშნოთ სტრუქტურა ხელახლა მთლიანად და ჩავრთოთ ჩასართავი **All** (ყველა) (ნახ. 24).

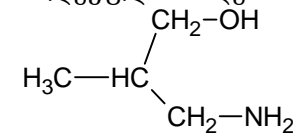
8. გავააქტიუროთ ღილაკი **Apply** (მიანიჭე). ამჯერად სტრუქტურაზე ყველა ნახშირბადატომი იქნება გამოსახული.



როგორც ვნახეთ ჰიდროქსილის მაგალითზე, ელემენტების სწრაფი მიწვდომის ღილაკების საშუალებით შესაძლებელია ფუნქციური ჯგუფების ჩასმა. მაგრამ აღნიშნული ღილაკებიდან შესაძლებელია მხოლოდ წყალბადებით შევსებული ფუნქციური ჯგუფების ჩანაცვლება. მაგალითად, აზოტის ატომით მიიღება ამინოჯგუფი, გოგირდის ატომით – მერკაპტოჯგუფი და ა.შ. როგორ მოვიქცეთ, თუ საჭიროა ნიტრო ან სულფოჯგუფის ჩასმა? ამისათვის ელემენტების სწრაფი მიღწევის პალიტრაზე დამონტაჟებულია ღილაკი



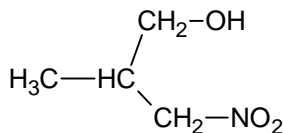
რომლის საშუალებითაც შესაძლებელია ნებისმიერი ჯგუფის ჩანაცვლება. ზემოთ აგებულ მოლეკულაში ერთ-ერთ პირველად ნახშირბადატომზე ჩავანაცვლოთ ნიტროჯგუფი. ამისათვის საჭიროა ჯერ ჩანაცვლდეს ნებისმიერი ელემენტი, მაგალითად აზოტი. მოლეკულა მიიღებს სახეს:



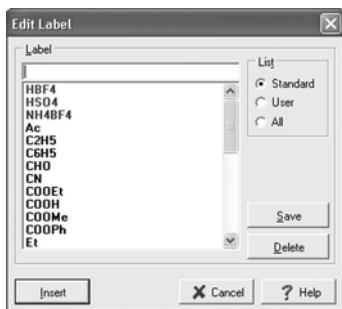
შემდეგ ავირჩიოთ ფუნქციური ჯგუფის ღილაკი. დავუბრუნდეთ აგებულ მოლეკულას და კურსორი მივუახლოვოთ ამინოჯგუფს. იგი მონინიშნება ბაცი მართკუთხედით. მარცხენა ღილაკის დაწკაპუნება ეკრანზე გამოიტანს დიალოგის ფანჯარას (ნახ. 25).

ტექსტურ ფანჯარაში შევიტანოთ „NO2“ ან მოვძებნოთ იგი ნუსხაში.

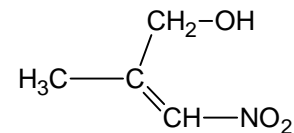
ბოლოს გავააქტიუროთ ღილაკი **Insert** (*ჩასმა*) (ნახ. 25). სტრუქტურა მიიღებს სახეს:



ჯერადი ბმების ასაგებად საჭიროა კურსორი მივიყვანოთ ერთმაგ ბმაზე და მისი გააქტიურების შემდეგ (ბმა მოექცევა ბაც მართკუთხედში) დავაწკაპუნოთ. ყოველი დაწკაპუნება ბმის ჯერადობას გაზრდის ერთით, ანუ სამმაგი ბმის ასაგებად საჭიროა ორჯერადი დაწკაპუნება. სამმაგ ბმაზე დაწკაპუნება კი მას გადააქცევს ერთმაგ ბმად. მაგალითისათვის ზემომოყვანილი 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპანოლ-1-ის სტრუქტურა გადავაკეთოთ 2-მეთილ-3-ნიტრო-2-პროპენ-1-ოლად. ამისათვის კურსორი მივიყვანოთ ბმაზე, რომელიც მოთავსებულია C<sub>2</sub>-C<sub>3</sub>-ს შორის და მისი გააქტიურების შემდეგ დავაწკაპუნოთ. სტრუქტურა მიიღებს შემდეგ სახეს:



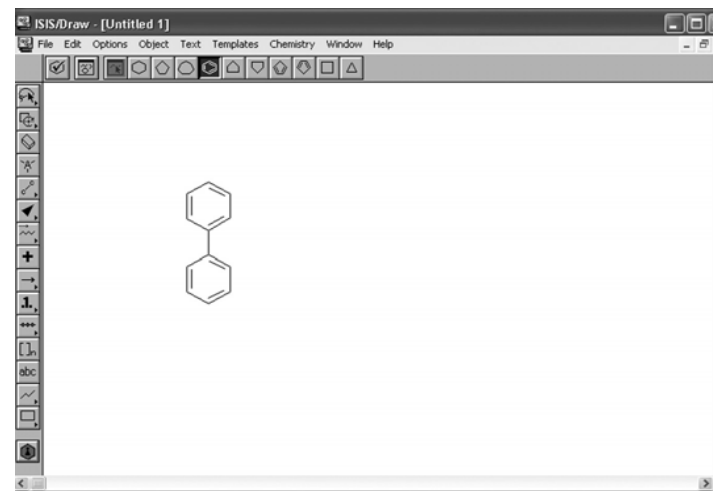
ნახ. 25. ფუნქციური ჯგუფის ჩართვის დიალოგის ფანჯარა



### 3.3. ქიმიური სტრუქტურების აგება პროგრამა ISIS DRAW-ში

2D-გრაფიკული პროგრამებიდან ერთ-ერთი საინტერესო პროგრამაა ISIS Draw. იგი საკმაოდ კომპაქტური, მცირე მოცულობისა და კარგად თავსებადი პროგრამაა Windows-ის ყველა ვერსიასთან და MS Office-ის პროგრამებთან. მისი ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 26-ზე.

სტრუქტურის აგებისათვის ძირითად მოწყობილობას



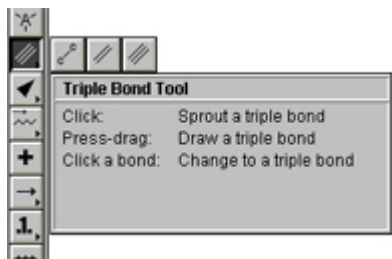
ნახ. 26. პროგრამა ISIS Draw-ის ინტერფეისი

წარმოადგენს ქიმიური ბმა (მსგავსად პროგრამისა Chem Draw). იგი მოთავსებულია ეკრანის მარცხენა სვეტში განლაგებული მოწყობილობების პალიტრაზე და აქვს შემდეგი სახე:



აღნიშნული ღილაკის საშუალებით შესაძლებელია ერთმაგი და ჯერადი (რამოდენიმეჯერ დაწკაპუნების შემთხვევაში) ბმების აგება. მაგრამ თუ თავუნას ღილაკს რამოდენიმე წამის განმავლობაში დავაყოვნებთ დაჭერილ მდგომარეობაში აღნიშნულ ღილაკზე, მაშინ გაისხნება დამატებითი, ჯერადი ბმების შესაბამისი ღილაკებიც (ნახ. 27). მათი არჩევის შემთხვევაში თავუნას ყოველი ერთჯერადი დაწკაპუნებისას აიგება შესაბამისი ჯერადი (ორმაგი, სამმაგი) ბმა.


ბმის აგებისას ეკრანზე ახლად აგებულ ბმას გააჩნია ორი პატარა კვადრატი (სელექციის წერტილები), რომელთაგან ერთი მოთავსებულია შუაში, ხოლო მეორე ბმის ბოლოში. ჩონჩხის გაგრძელებისათვის საჭიროა კურსორი მივიყვანოთ ბმის ბოლოში მოთავსებულ სელექციის წერტილზე და ისე დავაწკაპუნოთ თავუნას ღილაკზე. თუ სელექციის წერტილი სწორად არ იქნება მონიშნული, მაშინ ბმა აიგება, მაგრამ მას კავშირი არ ექნება წინა აგებულ სტრუქტურასთან, რამაც ზოგიერთ შემთხვევაში შეიძლება არასასურველ შედეგებამდე მივიყვანოს. ამიტომ, ყოველი ახალი ბმის აგებისას სწორად უნდა იქნას შერჩეული მისი „მიერთების“



ნახ. 27. ბმის აგების მოწყობილობის ღილაკები პროგრამაში ISIS Draw

წერტილი.

ავაგოთ მეთილვინილკეტონის მოლეკულის სტრუქტურა:

1. ავირჩიოთ ბმის აგების მოწყობილობა 
2. დავაწკაპუნოთ სამუშაო მაგიდის თავისუფალ ადგილას. აიგება ერთმაგი ბმა, რომელსაც ექნება ორი სელექციის (შუაში და ბმის ბოლოში) წერტილი:



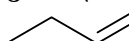
3. კურსორი მივიყვანოთ ბმის ბოლოში მოთავსებულ სელექციის წერტილზე და დავაწკაპუნოთ. აიგება პროპანის მოლეკულა, ხოლო სელექციის წერტილები გადაინაცვლებს ახლადაგებულ ბმაზე:



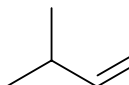
4. წინა ოპერაციის ანალოგიურად კიდევ ავაგოთ ერთი ბმა. მივიღებთ ნ-ბუტანის სტრუქტურას:



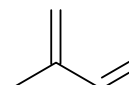
5. კურსორი მივიყვანოთ ბმის შუაში მოთავსებულ სელექციის წერტილზე და დავაწკაპუნოთ. ერთმაგი ბმა გადაიქცევა ორმაგ ბმად.




6. ახლა დავაკავშიროთ კეტონის ჯგუფი. კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის ნახშირბადატომზე და დავაწკაპუნოთ ერთხელ:

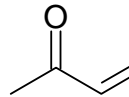


7. ახლადაგებული ბმა გადავაქციოთ ორმაგ ბმად, რისთვისაც კურსორი მივიყვანოთ ბმაზე და დავაწკაპუნოთ:



8. დავაკავშიროთ ჟანგბადის ატომი. ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან ავირჩიოთ ელემენტის

ჩართვის ინსტრუმენტი  და მივიყვანოთ კურსორი ორმაგი ბმის ბოლოში. დავაწკაპუნოთ. ეკრანზე გამოვა ჩამოსაშლელი ნუსხა, რომელშიც ელემენტებია ჩამოთვლილი. შევირჩიოთ "O".

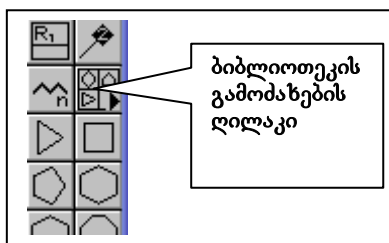


### 3.4. ბიბლიოთეკების გამოყენება სტრუქტურების აგებისათვის

2D-გრაფიკულ პროგრამებში სტრუქტურების აგების გამარტივებისათვის შექმნილია სპეციალური ბიბლიოთეკები, რომელთა საშუალებით შესაძლებელია როგორც სხვადასხვა კლასის ნაერთების სტრუქტურების, ისე ცალკეული ფრაგმენტების (რადიკალებისა და ფუნქციური ჯგუფების) არჩევა. მოძებნის გამარტივებისათვის აღნიშნული ელემენტები დაჯგუფებულია კლასების მიხედვით.

#### 3.4.1. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ChemDraw-ში

პროგრამა ChemDraw-ში ბიბლიოთეკის გამოძახება ხდება ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან (ნახ. 28).

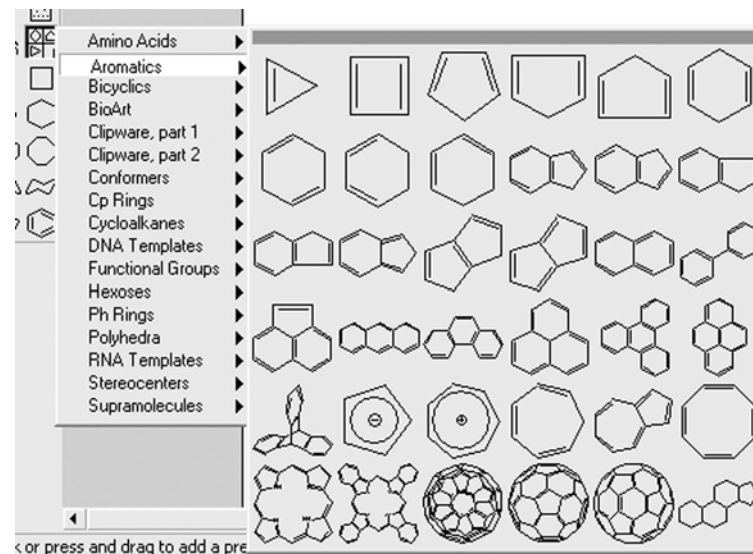


ბიბლიოთეკის გამოძახების ღილაკი

ნახ. 28. ძირითადი მოწყობილობების პალიტრის ფრაგმენტი. ნაჩვენებია ბიბლიოთეკის გამოძახების ღილაკი

აღნიშნულ ღილაკზე თავუნას დაწკაპუნებით გაიხსნება მენიუ, რომელშიც ჩამოთვლილია ნაერთების კლასები. აქ ჩვენ შეგვიძლია ავარჩიოთ შემდეგი კლასის ნაერთები: ამინომჟავები, არომატული, ბიციკლური, მონოციკლური ნაერთები, რიბონუკლეინ და დეზოქსირიბონუკლეინმჟავები და სხვა. ნახ. 29-ზე ნაჩვენებია არომატული სტრუქტურები, რომელთა შერჩევაც შესაძლებელია ბიბლიოთეკიდან.

პალიტრიდან საჭირო სტრუქტურის არჩევა ხდება შესაბამის სტრუქტურაზე თავუნას ღილაკის დაწკაპუნებით. მისი შერჩევის შემდეგ მენიუ იხურება და კურსორი ბრუნდება სამუშაო სივრცეში. თავუნას კურსორის მიყვანით სასურველ ადგილზე და დაწკაპუნებით ეკრანზე საბოლოოდ დაფიქსირდება შერჩეული მზა სტრუქტურა. ამგვარად შექმნილ



ნახ. 29. არომატული სტრუქტურების შაბლონები

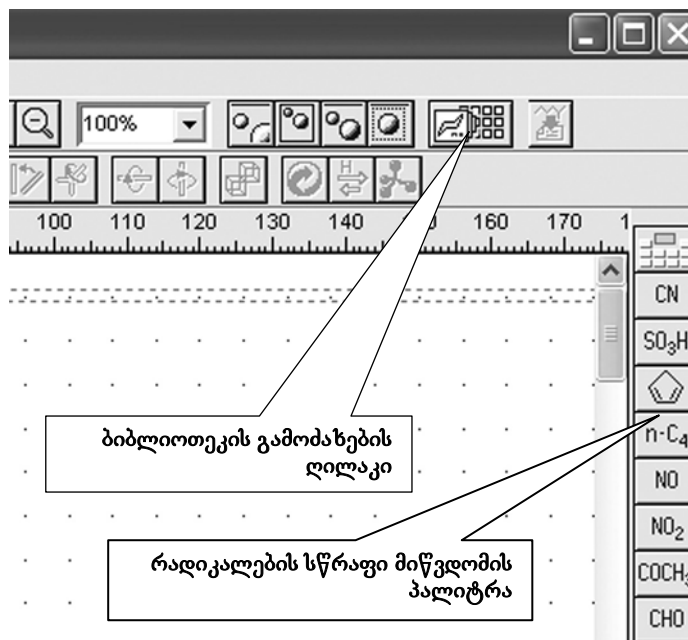
მოდელს აქვს რეალური ქიმიური სტრუქტურის თვისება, ანუ შესაძლებელია მასზე დამატებითი ბმების ჩართვა.

#### 3.4.2. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ChemSketch-ში

პროგრამა ChemSketch-ში სტრუქტურების ბიბლიოთეკის გამოძახება შესაძლებელია რამოდენიმე მეთოდით. უმარტივეს და უმოკლეს მეთოდს წარმოადგენს შესაბამის პიქტოგრამაზე დაწკაპუნება. ბიბლიოთეკის ღილაკი მოთავსებულია მარჯვენა კუთხეში მენიუს ზოლის ქვეშ (ნახ. 30).

ბიბლიოთეკის გამოძახების მეორე ასევე სწარფი მეთოდია ე.წ. „ცხელი ღილაკი“. კლავიატურაზე **F5** ღილაკის გააქტიურება იდენტურია ზემოთ აღწერილი ოპერაციისა. მესამე მეთოდს წარმოადგენს პროგრამის მენიუდან შესაბამისი ბრძანების გაცემა. ამ შემთხვევაში ბიბლიოთეკის გამოძახებისათვის უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Template Window**



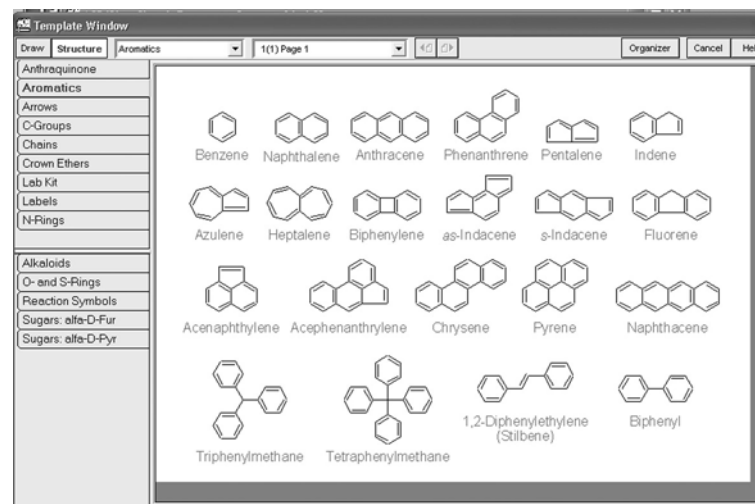


ნახ. 30. ბიბლიოთეკის გამოძახების ღილაკი პროგრამაში ChemSkertch

(შაბლონების ფანჯარა), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Templates (შაბლონები)**.

სამივე აღწერილ მოქმედებას მივყავართ ეკრანზე ბიბლიოთეკის ფანჯრის გახსნამდე (ნახ. 31).

ფანჯრის მარცხენა მხარეს ჩამოთვლილია ჯგუფები, რომელიც აერთიანებს ერთი კლასის სტრუქტურებს. ასეთი ღილაკების რაოდენობა 12-ია. თუმცა პროგრამას გაცილებით მეტი რაოდენობის მზა შაბლონები გააჩნია. მათი გამოძახება ხდება ფანჯრის თავზე ჩამოსაშლელი ნუსხიდან. გარდა ამისა, ერთი კლასის შაბლონების რაოდენობა შეიძლება იმაზე მეტი იყოს, რისი დატევაც შესაძლებელია ერთ ეკრანზე. ასეთ შემთხვევაში საჭიროა გადასვლა შემდეგ გვერდებზე შესაბამისი ღილაკების საშუალებით, რომლებიც დამონტაჟებულია ასევე ფანჯრის ზედა ნაწილში. ნახ. 31-ზე მოცემული სურათის მიხედვით ჩანს, რომ შერჩეულია არომატული



ნახ. 31. სტრუქტურების ბიბლიოთეკის ფანჯარა პროგრამაში ChemSketch

სტრუქტურების შაბლონები (**Aromatics**), რომლის მონაცემებიც იკავებს მხოლოდ ერთ გვერდს „1(1) Page 1“.

ბიბლიოთეკიდან შერჩეული სტრუქტურა შეიძლება „აღებულ“ იქნას როგორც ქიმიური სტრუქტურა და როგორც ნახატი. პირველ შემთხვევას ადგილი ექნება, თუ ბიბლიოთეკის ელემენტის არჩევისას ჩართული იქნება **Structure (სტრუქტურა)** რეჟიმი (მისი ჩართვა შეიძლება ნახ. 31-ზე გამოსახული შესაბამისი ღილაკით). აღნიშნული რეჟიმის შემთხვევაში მოლეკულის არჩევისას საშუალება გვაქვს სტრუქტურასთან ერთად შევირჩიოთ ის ბმაც ან ატომიც, რომლის საშუალებითაც უნდა დაუკავშირდეს იგი სხვა სტრუქტურას. მაგალითად, ბიბლიოთეკის დახმარებით ავაგოთ დიფენილისა და ნაფთალინის მოლეკულები.

დიფენილის მოლეკულის აგებისათვის თანამიმდევრულად შევასრულოთ შემდეგი ოპერაციები:

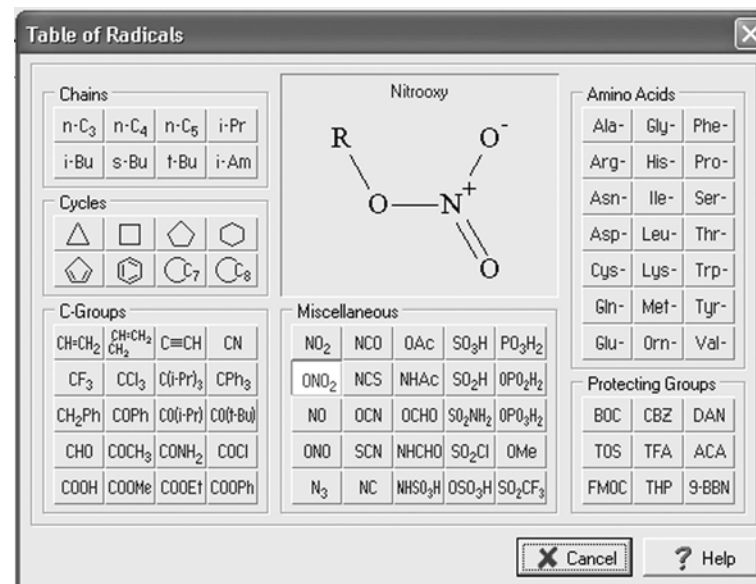
1. გამოვიძახოთ ბიბლიოთეკის ფანჯარა F5 ღილაკზე თითო დაჭერით (ან სხვა ზემოთ აღწერილი მეთოდებით);

- მარცხენა მხარეს ჩამოთვლილ ნაერთების კლასებში მოვებნოთ არომატული (Aromatics) შაბლონები და გავააქტიუროთ შესაბამისი ღილაკი. თუ ჩამოთვლილ ნუსხაში არ იქნება აღნიშნული ღილაკი, მაშინ იგი გამოვიძახოთ ჩამოსაშლელი ნუსხიდან (ნახ. 31);
- კურსორი მივიყვანოთ ბენზოლის სტრუქტურასთან. კურსორის მიახლოებისას ბენზოლის სტრუქტურის ცალკეული ელემენტები (ნახშირბადატომები და ბმები) მონიშნება, რაზეც მეტყველებს ბაცი მართკუთხედის გამოჩენა. კურსორი შევარჩიოთ ერთ-ერთ ნახშირბადატომზე და ისე „ავილოთ“ მოლეკულა;
- სამუშაო სივრცეში დაბრუნების შემდეგ ბენზოლის ბაცი მოლეკულა გადაადგილდება კურსორთან ერთად. მისი ეკრანზე ფიქსაციისათვის დავაწკაპუნოთ სასურველ ადგილზე. ეკრანზე დაინახება ერთი ბენზოლის მოლეკულა, ხოლო ბაცი სტრუქტურა კვლავ გააგრძელებს მოძრაობას კურსორთან ერთად;
- ჩვენს მიერ ერთი ბენზოლის მოლეკულა უკვე აგებულია. ახლა საჭიროა მასთან ბენზოლის მეორე მოლეკულის დაკავშირება. კურსორი მივუახლოვოთ უკვე აგებულ ბენზოლის მოლეკულას. შევნიშნავთ, რომ როდესაც კურსორი იმყოფება ერთ-ერთ ნახშირბადატომთან სიახლოვეში, ბაცი ხაზის საშუალებით მყარდება კავშირი „მუქ“ ბენზოლის მოლეკულასა და „ბაც“ ბენზოლის მოლეკულას შორის. (ამასთანავე, მივაქციოთ ყურადღება, რომ კურსორის მიახლოებისას ბენზოლის ბმებთან, არანაირი რეაქცია არ ექნება „ბაც“ ბენზოლის მოლეკულას). დავაწკაპუნოთ თავუნას ღილაკზე. ეკრანზე აიკვება დიფენილის მოლეკულა.

ახლა ავაგოთ ნაფთალინის მოლეკულა:

- ანალოგიურად გამოვიძახოთ ბიბლიოთეკის ფანჯარა;

- შევარჩიოთ ბენზოლის მოლეკულა იმ დროს, როდესაც ბაცი მართკუთხედი იქნება ერთ-ერთი ბმის გარშემო;
- სამუშაო ეკრანზე დავაწკაპუნოთ. დაინახება ერთი ბენზოლის მოლეკულა, ხოლო ბაცი ბენზოლის მოლეკულა წინა შემთხვევის ანალოგიურად, გააგრძელებს მოძრაობას კურსორთან ერთად;



ნახ. 32. რადიკალების პალიტრის ფანჯარა პროგრამაში ChemSketch

- მივუახლოვოთ კურსორი უკვე აგებულ ბენზოლის მოლეკულას. ვნახავთ, რომ წინა შემთხვევისაგან განსხვავებით, „მუქ“ და „ბაც“ ბენზოლის მოლეკულებს შორის კავშირი წარმოიქმნება მხოლოდ კურსორის ბმასთან მიახლოებისას. წარმოქმნილი ბმის შემთხვევაში დავაწკაპუნოთ. დაინახება ნაფთალინის მოლეკულა.

პროგრამა ChemSketch მოლეკულების შაბლონების გარდა მოიცავს რადიკალების შაბლონებსაც. რადიკალების შაბლონების ფანჯრის გამოძახება შესაძლებელია F6 ღილაკის

გააქტიურებით (ნახ. 32). შერჩევის შემდეგ რადიკალი ემატება აგრეთვე სწრაფი მიწვდომის პალიტრას (ნახ. 30), საიდანაც შესაძლებელი ხდება მისი შემდგომი შერჩევა დიალოგის ფანჯრის ხელახალი გამოძახების გარეშე.

### 3.4.3. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ISIS Draw-ში

პროგრამა ISIS Draw-ში სტრუქტურების ბიბლიოთეკის გამოძახება ხდება უშუალოდ მენიუდან **Templates (შაბლონები)**. ნაერთების რომელიმე კლასის შერჩევისათვის უნდა გააქტიურდეს შესაბამისი ბრძანება. მაგალითად ამინომჟავებისათვის – Amino Acids, არომატული სტრუქტურებისათვის – Aromatics, და ა.შ. ბრძანება **Open (გახსნა)** მენიუდან **Templates (შაბლონები)** საშუალებას გვაძლევს გავხსნათ ერთი კონკრეტული სტრუქტურა, რომელიც სისტემაში ჩაწერილია შესაბამისი \*.SKC გაფართოების მქონე ფაილების სახით. აქვე უნდა აღინიშნოს, ამ უკასკენელ შემთხვევაში აუცილებელია მიზნობრივი შაბლონის ფაილის ზუსტი დასახელების ცოდნა და ამდენად ეს მეთოდი ნაკლებად ხელსაყრელია.

შაბლონის გამოძახება და მისი დატანა სამუშაო მაგიდაზე ანალოგიურია წინა პარაგრაფში განხილული შემთხვევისა და ამიტომ ამ თავში მას დაწვრილებით აღარ განვიხილავთ.

### 3.5. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები

სტრუქტურების აგებისას ხშირად საჭირო ხდება ისეთი ოპერაციების ჩატარება, როგორცაა გადაადგილება (XY-ტრანსფორმაცია), შემობრუნება სიბრყეზე (XZ-ტრანსფორმაცია) ან სივრცეში (XYZ-ტრანსფორმაცია). აღნიშნული ოპერაციების ჩატარება დოკუმენტების ბევრად უფრო ლამაზად და ინფორმაციულად გაფორმების საშუალებას იძლევა.

ზემოჩამოვლილი ტრანსფორმაციების განხორციელება შესაძლებელია მხოლოდ მონიშნულ სტრუქტურებზე. ამ ოპერაციების ჩატარებას წინ უსწრებს შესაბამისი ობიექტის მონიშვნა.

### 3.5.1. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები პროგრამა ChemDraw-ში

მონიშვნის შესაბამისი ღილაკები პროგრამა ChemDraw-ში მოთავსებულია ძირითადი მოწყობილობების პალიტრის ზედა ნაწილში.

ობიექტის მონიშვნისათვის უნდა ავირჩიოთ მონიშვნის ღილაკი (ნახ. 33) და თავუნას მარცხენა ღილაკზე თითის აულებლად მოსანიშნი ობიექტის გარშემო უნდა შემოვხაზოთ მართკუთხედი ან შეკრული წირი. ღილაკიდან თითის ალების შემდეგ სტრუქტურა გაბაცდება, მოექცევა ბაც ჩარჩოში და



ნახ. 33. თავისუფალი (Lasso) და მართხუთხა (Marquee) მონიშვნის ღილაკები პროგრამა ChemDraw-ში

დაიწყებს ციმციმს. აღნიშნული მეთოდით შესაძლებელია როგორც მთლიანი მოლეკულის, ისე მისი ცალკეული ფრაგმენტის მონიშვნა. მონიშნულ ფრაგმენტს ექნება შემდეგი სახე:



მის სიბრტყეზე (ფურცელზე) გადაადგილებისათვის კურსორი შევიყვანოთ მონიშნული სტრუქტურის შიგა სივრცეში. კურსორი ამ სივრცეში მოხვედრისას იცვლის სახეს და ხელის ფორმას იღებს.

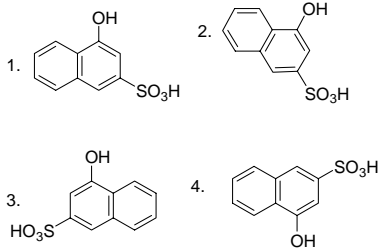


ეს მიგვანიშნებს, რომ ამ დროს შესაძლებელია მისი გადავიღება. გადავიღებისათვის საჭიროა თავუნას ღილაკს დავაწვეთ და გავაცუროთ ნებისმიერი მიმართულებით. თავუნას ღილაკზე თითის ალების შემდეგ ობიექტი კვლავ მონიშნული რჩება. მონიშვნის გაუქმებისათვის საჭიროა სადმე თავისუფალ ადგილზე თავუნას ღილაკის დაწკაპუნება.

მონიშნული ობიექტის შემობრუნება სიბრტყეში შესაძლებელია მენიუსა და მონიშვნის ჩარჩოს საშუალებით. თუ კურსორს მივუახლოვებთ მონიშნული ობიექტის გარშემო არსებულ ჩარჩოს ზედა მარჯვენა კუთხეს, მაშინ იგი მიიღებს მოხრილი ორთავა ისრის ფორმას.



სანამ კურსორს აღნიშნული ფორმა აქვს, თავუნას გადაადგილება მარცხენა ღილაკზე დაჭერით მდგომარეობაში გამოიწვევს მონიშნული ობიექტის შემობრუნებას (XY-ტრანსფორმაცია).



- ნახ. 34. მოლეკულების ტრანსფორმაციები:  
 1-საწყისი მოლეკულა,  
 2- 30°-იანი კუთხით შემობრუნება,  
 3- ჰორიზონტალური გარდასახვა (Flip Horizontal),  
 4- ვერტიკალური გარდასახვა (Flip Vertical)

ტიკალური და ჰორიზონტალური სიმეტრიის ღერძის მიმართ. ამისათვის გამოიყენება ბრძანებები **Flip Horizontal** (გარდასახვა ჰორიზონტალური ღერძის მიმართ) და **Flip Vertical** (გარდასახვა ვერტიკალური ღერძის მიმართ) (ნახ. 34).

### 3.5.2. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები პროგრამა ChemSketch-ში

მოლეკულების გეომეტრიული ტრანსფორმაციები ასევე შესაძლებელია პროგრამა ChemSketch-ში. XY-ტრანსფორმაციისათვის, ისევე როგორც პროგრამა ChemDraw-ში, საჭიროა სტრუქტურის წინასწარი მონიშვნა. მონიშვნა



წარმოებს შესაბამისი ღილაკის გააქტიურებით. მონიშნული სტრუქტურის თითოეულ ელემენტზე (თითოეულ ატომსა და ბმაზე) ჩნდება პატარა შეუფერადებელი კვადრატები. კურსორის მიყვანისას ერთ-ერთ მონიშნულ ატომზე (და არა სტრუქტურის შიგნით, როგორც ამას ადგილი ჰქონდა პროგრამაში ChemDraw) იგი იცვლის სახეს და იღებს ისრების მქონე ჯვრის ფორმას. ამასთანავე, მონიშვნის სიმბოლოები - გაუფერადებელი კვადრატები, შეიფერება შავად. თავუნას ღილაკზე თითის დაჭერით შესაძლებელია მისი გაადგილება XY-სიბრტყეში.



მოლეკულის XY-სიბრტყეში ტრანსფორმაცია შესაძ-

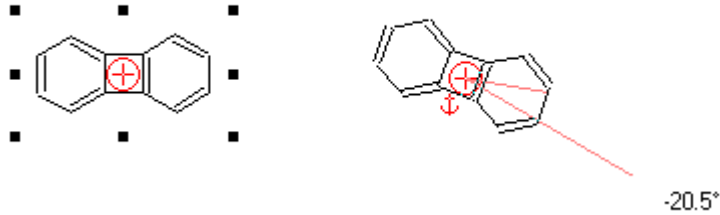


ლებელია ღილაკის გააქტიურებით. ამასთანავე არ არის საჭირო მოლეკულის წინასწარი მონიშვნა. აღნიშნულ რეჟიმში კურსორი ხდება სპეციფიური და მას ორივე მხრიდან ისრებით შემოსაზღვრული რკალის ფორმა აქვს. მოლეკულის შემობრუნებისათვის უნდა ჩავატაროთ შემდეგი მოქმედებები:

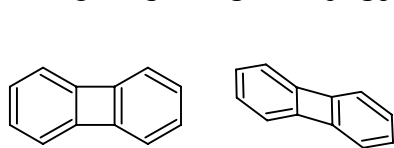
1. მივიყვანოთ თავუნას ღილაკი მოლეკულის შიგა სივრცეში და დავაწკაპუნოთ. კურსორის დაწკაპუნების ადგილზე გაჩნდება წითელი წრე შიგ ჩახატული ჯვრით.

ეს წერტილი მიუთითებს მოლეკულის შემობრუნების ცენტრს.


2. კურსორი მივიყვანოთ მოლეკულის ერთ-ერთ ელემენტთან (ატომი, ბმა). კურსორი მიიღებს მოხრილი ორთავიანი ისრის ფორმას. დავაწვეთ თავუნას ღილაკს და თითის აულებლად გავამოძრავოთ იგი. მოლეკულა დაიწყებს შემობრუნებას. ამასთანავე, წითელი ხაზებით დაინახება კუთხე კურსორის ახალ, ბრუნვის ცენტრსა და კურსორის საწყის წერტილებს შორის. იქვე გამოჩნდება შემობრუნების კუთხის რიცხვითი მნიშვნელობაც.



პროგრამა ChemSketch-ში შესაძლებელია აგრეთვე XYZ-ტრანსფორმაცია (სივრცეში ტრანსფორმაცია). ამისათვის



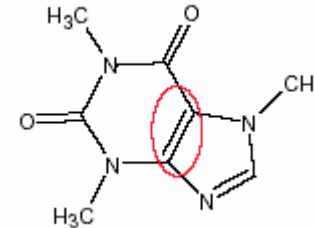
ნახ. 35. პროგრამა ChemSketch-ში მოლეკულის სივრცეში ტრანსფორმაცია: მარცხნივ მოცემულია საწყისი მოლეკულა, მარჯვნივ – სივრცეში შემობრუნებული

გამოიყენება ღილაკი . მოლეკულის სივრცეში შემობრუნებისათვის საჭირო არ არის მისი წინასწარი მონიშვნა. საკმარისია კურსორი მივიყვანოთ მოლეკულის ერთ-ერთ ელემენტზე და თავუნა ვამოძრავოთ მარცხენა ღილაკზე დაჭერილ მდგომარეობაში. მოლეკულა შემობრუნდება სივრცეში (ნახ. 35).

გარდა აღნიშნული ტრანსფორმაციებისა, პროგრამა ChemSketch საშუალებას გვაძლევს ჩატარებული იქნას სხვა ტიპის გარდაქმნებიც.

აღნიშნული ტრანსფორმაციები ტარდება მოლეკულის ბმების მიხედვით, მაგრამ ტრანსფორმაციის შედეგი ვრცელდება მთლიან მოლეკულაზე. თუ საჭიროა მხოლოდ ლოკალური ტრანსფორმაცია, მაშინ უნდა მონიშნოს მხოლოდ შესაბამისი ფრაგმენტი და მასზე ჩატარდეს გარდაქმნები.

ვთქვათ მოცემული გვაქვს შემდეგი სახის მოლეკულა:




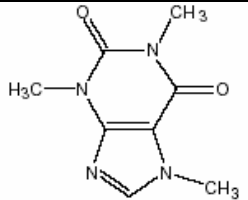

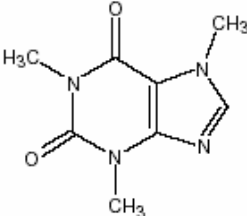
ტრანსფორმაციები ჩავატაროთ ოვალით შემოხაზულ ბმაზე შემდეგი ღილაკების გამოყენებით:


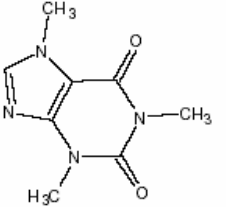

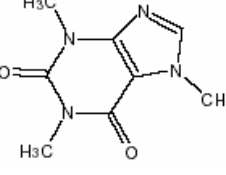

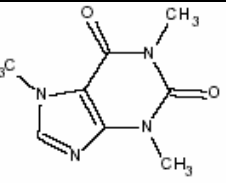


ვირჩევთ ერთ-ერთ ღილაკს



კურსორი მიგვყავს ზემოთმონიშნულ ბმაზე და თავუნას მარცხენა ღილაკზე ვაწკაპუნებთ. ტრანსფორმაციების შედეგები მოცემულია ცხრილის სახით:

| ღილაკი  | ფუნქცია   | შედეგი  |
|---|---|---|
|  | ბმა იღებს ჰორიზონტალურ მდგომარეობას. მასთან ერთად შემობრუნდება მთელი მოლეკულა |   |
|  | ბმა იღებს ვერტიკალურ მდგომარეობას. მასთან ერთად შემობრუნდება მთელი მოლეკულა   |  |

| ლილაკი  | ფუნქცია  | შედეგი  |
|---|--|---|
|  | მოლეკულა გარდაისახება ბმაზე გამავალი ღერძის მიმართ   |  |
|  | მოლეკულა გარდაისახება ჰორიზონტალური ღერძის მიმართ (თუ ეკრანზე რამოდენიმე სტრუქტურაა, მაშინ აუცილებელია მთლიანი მოლეკულის მონიშვნა) |  |
|  | მოლეკულა გარდაისახება ვერტიკალური ღერძის მიმართ (თუ ეკრანზე რამოდენიმე სტრუქტურაა, მაშინ აუცილებელია მთლიანი მოლეკულის მონიშვნა)   |  |


#### 4. ბიზეს ბრაფიკული ელემენტების გამოყენება


ქიმიური ფორმულებისა და რეაქციების თვალსაჩინოდ გაფორმებისათვის ხშირად აუცილებელია გეომეტრიული ელემენტების გამოყენება, როგორცაა მაგალითად ისრები, ელექტრონული ორბიტალები, წირები, რეაქციის კინეტიკური პროფილები, გეომეტრიული ფიგურები. მათ გამოყენებას გარდა დიზაინისა, ხშირად ქიმიური დატვირთვაც გააჩნია.


ამიტომ, ქიმიური სტრუქტურების გრაფიკული რედაქტორების საშუალებით ასევე შესაძლებელია გრაფიკული ელემენტების აგებაც.


#### 4.1. გეომეტრიული ელემენტების გამოყენება პროგრამა CHEMDRAW-ში

პროგრამაში გათვალისწინებულია შემდეგი სახის გეომეტრიული ელემენტების შექმნა:

 ისრების აგების ინსტრუმენტი

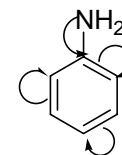
 გეომეტრიული ფიგურების (მართხუთხედები, წრეები, ფრჩხილები) ინსტრუმენტი

 რკალების ინსტრუმენტი

 ინსტრუმენტი „კალამი“

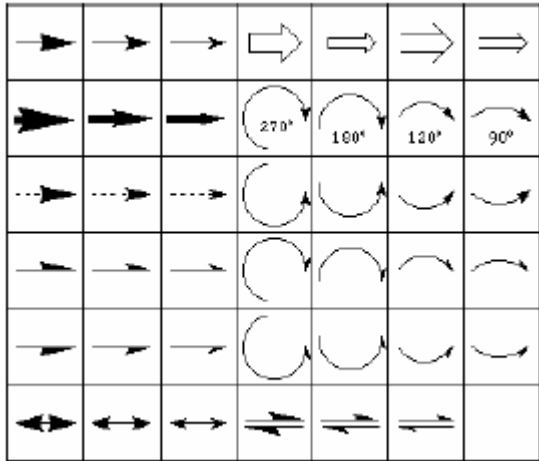
პირველი სამი ინსტრუმენტის ლილაკზე ქვედა მარჯვენა კუთხეში გამოსახულია მარჯვნივ მიმართული მუქი ისარი, რაც მიუთითებს დამატებითი ფანჯრის გახსნის შესაძლებლობას. თითოეულ მათგანზე თითის დაჭერით გაიშლება ფანჯარა, რომელშიც საშუალება გვაქვს ავარჩიოთ ისრის კონკრეტული ფორმა. შერჩევისათვის თავუნა უნდა გადავადგილოთ თითის აულებლად სასურველ ობიექტამდე. შერჩევა მოხდება თითის ალების მომენტში. ისრების ინსტრუმენტი შეიცავს სხვადასხვა სისქის კონტურის, სხვადასხვა მიმართულებისა და სხვადასხვა კუთხით მოხრილ ისრებს (ნახ. 36).

ანალოგიურად, რკალების მოწყობილობის გააქტიურებისას შესაძლებელია ავირჩიოთ სხვადასხვა კუთხით მოხრილი რკალი. ისრებისა და რკალების გამოყენება ხშირად საჭირო ხდება ელექტრონული ღრუბლების გადანაწილების გამოსახვისათვის, როგორც ეს ქვემოთაა ნაჩვენები:

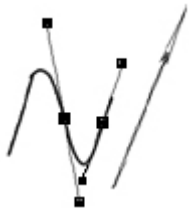


მართკუთხედებისა და წრეწირების აგება საკმაოდ მარტივია და სხვა გრაფიკული პროგრამებში ანალოგიური ელემენტების აგების მსგავსია.

მიუხედავად რკალებისა და ისრების მრავალი სტანდარტული მოხაზულობისა, ზოგჯერ არ არის შესაძლებელი ჩვენთვის სასურველი კონტურის აგება. კონტურების აგების მძლავრ საშუალებას წარმოადგენს „თავისუფალი კალამი“, რომელიც წირის აგებისას თავის იყენებს ბიზეს კრალებს. აღნიშნული ინსტრუმენტი შედის პრაქტიკულად ყველა



ნახ. 36. პროგრამა ChemDraw-ში ისრების ფორმის არჩევის დიალოგური ფანჯარა



ნახ. 37. ბიზეს რკალების აგება „თავისუფალი კალმის“ საშუალებით

გრაფიკულ პროგრამაში CorelDraw, PhotoShop და სხვა. მოკლედ შევეხებით „თავისუფალი კალმის“ მუშაობის პრინციპს. მისი საშუალებით შესაძლებელია რკალების გაღება ორ წერტილს შორის. რკალის პროფილის შერჩევა და ვარიანტების წარმოება წერტილებზე გამავალი მხეების

გადაადგილებით (ნახ. 37). რკალის მომრგვალების პროფილისა და კუთხის ცვლილებისათვის თავს უნდა კურსორი, რომელსაც ხელის ფორმა აქვს, მივიყვანოთ მხეების ბოლოებში მოთავსებულ მუქი ფერის კვადრატებზე, დავაჭიროთ მარცხენა ლილაკს და თავს უნდა გავაცუროთ სასურველი მიმართულებით. მხეების სიგრძისა და დახრის კუთხის ცვლილების შესაბამისად შეიცვლება წირის პროფილიც.

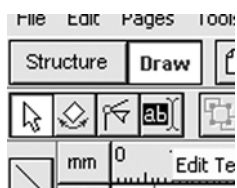
წირის გრაფიკული გამოსახულების ვარიანტების შესაძლებელია პროგრამის მენიუდან **Curves (წირი)**. იმისათვის რომ საშუალება გვქონდეს გამოვიყენოთ მენიუს **Curves (წირი)** ბრძანებები, საჭიროა ვიმყოფებოდეთ „თავისუფალი კალმის“ რეჟიმში. ამ რეჟიმში ყოფნის დროს წირი ყოველთვის მონიშნულია. ამიტომ მენიუდან ნებისმიერი ბრძანების გაცემა მაშინვე აისახება აგებულ წირზე.

მენიუ **Curves**-სი ბრძანებებია:

- plain - წირის გამოსახვა ჩვეულებრივი ხაზით
- dashed - წირის გამოსახვა პუნქტირული ხაზით
- Bold - წირის გამოსახვა მუქი ხაზით
- Arrow at start - წირის დაწყება ისრით
- Arrow at end - წირის დაბოლოება ისრით
- Half arrow at start - წირის დაწყება ერთფრთიანი ისრით
- Half arrow at end - წირის დაბოლოება ერთფრთიანი ისრით
- Closed - შეკრული წირის აგება (წირის აგებისას თავისით იკვრება თავი და ბოლო)
- Filled - წირის აგებისას მიღებული შეკრული კონტურის შიგნით არსებული სივრცე შეფერავდება.

## 4.2. ბეომეტრული ელემენტების ბაოყენება პროგრამა CHEMSKETCH-ში

პროგრამა ChemSketch აღჭურვილია უფრო მდიდარი გრაფიკული ელემენტების აგების საშუალებით, ვიდრე პროგრამა ChemDraw. პროგრამა, როგორც წესი, მუშაობს ორ განსხვავებულ რეჟიმში: სტრუქტურების აგებისა და გრაფიკულ რეჟიმში. შესაბამისი რეჟიმების გადართვა ხდება მარცხენა ზედა კუთხეში დამონტაჟებული სპეციალური ღილაკებით (ნახ. 38).



ნახ. 38. ხატვის რეჟიმის გადასართავი ღილაკი პროგრამა ChemSketch-ში

ლიტრაზე გვაქვს წირის, რკალის, ტეხილის, კლაკნილი წირის, წრის, მართკუთხედის, ბლაგვკუთხედიანი მართკუთხედის და სხვა ღილაკები. აქვე არის ტექსტის შეტანის ღილაკიც. თითოეული მათგანის გარჩევა მეტად მარტივია ღილაკების შესაბამისი ნახატებიდან გამომდინარე.

ხატვის რეჟიმის გადართვისათვის საჭიროა გავაქტიუროთ ღილაკი **Draw** (ხატვა). მისი გააქტიურების შემდეგ შევნიშნავთ, რომ პროგრამის ინტერფეისი მნიშვნელოვნად შეიცვლება. კერძოდ, ეკრანიდან გაქრება სტრუქტურების აგებისათვის საჭირო ღილაკები, და მათ ადგილს დაიკავებს გეომეტრიული ელემენტების აგებისა და მათი ტრანსფორმაციებისათვის საჭირო ღილაკები. Draw (ხატვა) რეჟიმში ძირითადი მოწყობილობების პა-

## 5. სამგანზომილებიანი ბრაფიკული პროგრამები (3D-ბრაფიკა)

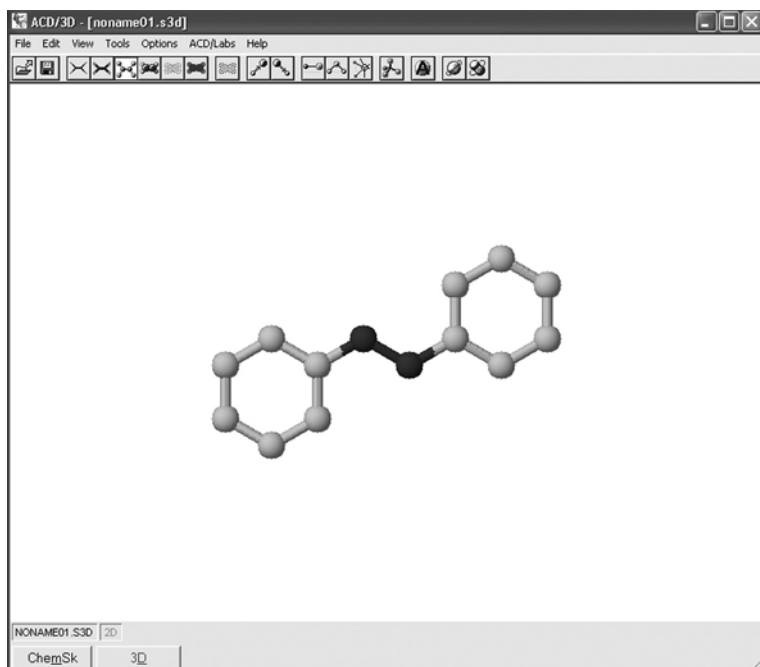
სამგანზომილებიანი (სივრცული) სტრუქტურების აგება საშუალებას გვაძლევს მოლეკულის აღნაგობის შესახებ გვეჩვენოს უფრო სრული და თვალსაჩინო წარმოდგენა. იგი დღეისათვის სულ უფრო და უფრო პოპულარული ხდება, ვინაიდან დიდ დახმარებას უწევს ქიმიკოსებს ოპტიკური იზომერიის, სტერეოგულარული სინთეზის და სხვა მსგავსი ამოცანების გადაწყვეტაში. ცნობილია, რომ ბიოლოგიურად აქტიურ ნაერთებს წარმოადგენენ სტერიულად მკაცრად განსაზღვრული სტრუქტურის მქონე ნაერთები. მათ სინთეზსა და შესწავლაში სამგანზომილებიანი გრაფიკული პროგრამები სულ უფრო და უფრო ღრმად ერთვებიან. გარდა ამისა, სამგანზომილებიანი სტრუქტურების აგების გარეშე შეუძლებელია ქვანტურ-ქიმიური გაანგარიშებებისა და მოდელირების ამოცანების გადაწყვეტა (ამ უკანასკნელებზე ქვემოთ იქნება საუბარი).

სამგანზომილებიანი მოლეკულების აგება შესაძლებელია რამოდენიმე პროგრამის საშუალებით. მათგან ჩვენ განვიხილავთ ორ პროგრამას: 3D Viewer (პაკეტი ACD Labs) და Chem3D (პაკეტი Chem Office ).



## 5.1. 3D-გრაფიკული სტრუქტურების აგება ACD LABS პაკეტის საშუალებით

Acid Labs პაკეტის საშუალებით სამგანზომილებიანი სტრუქტურების აგება მოითხოვს ორი ოპერაციის შესრულებას: ჯერ აიგება ორგანოზომილებიანი სტრუქტურა, ხოლო შემდეგ წარმოებს მისი ტრანსპორტირება პროგრამა 3D Viewer-ში. ამ უკანასკნელში კი ორგანოზომილებიანი სტრუქტურა გარდაიქმნება სამგანზომილებიანად.

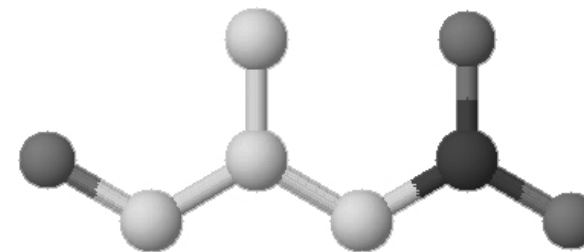


ნახ. 39. პროგრამა 3D Viewer-ის ინტერფეისი

პროგრამა 3D Viewer-ის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 39-ზე. იგი შედის პროგრამულ პაკეტში Acid Labs-ში. როგორც უკვე იყო აღნიშნული, თვით პროგრამა 3D Viewer-ში

სტრუქტურის აგება არ ხდება. იგი ახორციელებს ორგანოზომილებიანი სტრუქტურის იმპორტს პროგრამიდან ChemSketch. მისი გამოძახება პროგრამიდან 3D Viewer შესაძლებელია ეკრანზე მარცხენა ქვედა კუთხეში მოთავსებული ლილაკის ChemSk-ის გააქტიურებით (ნახ. 39). მასზე თავუნას ლილაკის დაწკაპუნება გაუშვებს პროგრამას ChemSketch (სტრუქტურის აგება განხილულია § 3.2., გვ. 37). სტრუქტურის აგების დასრულების შემდეგ საჭიროა მისი ექსპორტირება ChemSketch-დან 3D Viewer-ში. ამისათვის უნდა გააქტიურდეს ChemSketch-ის მარცხენა ქვედა კუთხეში განთავსებული ლილაკი Copy to 3D (კოპირება 3D-ში) გააქტიურებით\*.

სამგანზომილებიანი სტრუქტურა შესაძლებელია წარმოდგინდეს სხვადასხვა ვიზუალური გამოსახვის საშუალებებით. ვიზუალური გამოსახულების ცვლილებისათვის გამოიყენება მენიუ View (ჩვენება). მოლექულა შესაძლებელია გამოსახული იყოს ჩოჩხის (Wireframe), წკირების (Sticks), ბირთვებისა და წკირების (Balls & Sticks), წერტილების (Dots only), დისკების (Disks), სიცარიელე შევსებული (Spacefill) სახით. უფრო მეტი სიცხადისათვის ანილინის მოლექულა

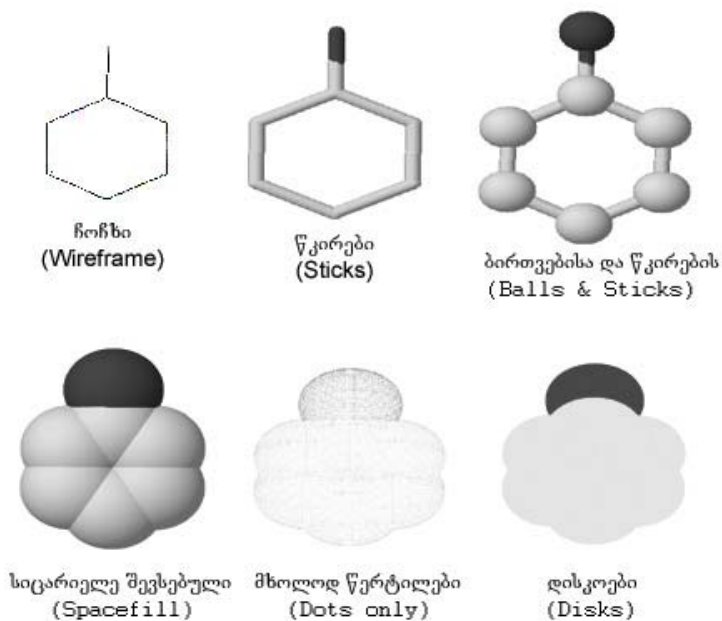


ნახ. 40. 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპან-1-ოლის მოლექულა. გამოსახულია ბირთვებისა და წკირების საშუალებით

ავაგოთ სხვადასხვა ფორმით (ნახ. 41).

\* აღნიშნული ლილაკები ეკრანზე ჩანს მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ პროგრამა ChemSketch გამოძახებულია პროგრამიდან 3D Viewer. ChemSketch-ის ავტონომიურ რეჟიმში გაშვებისას ეს ლილაკები არ ჩაიტვირთება.

ახლა 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპან-1-ოლის კონკრე-



ნახ. 41. ანილინის მოლეკულის სხვადასხვაგვარი სამგანზომილებიანი სტრუქტურები

ტულ მაგალითზე განვიხილოთ სამგანზომილებიანი სტრუქტურის აგება:

Start-ის ღილაკიდან გავუშვათ პროგრამა 3D Viewer. მარცხენა ქვედა კუთხეში მოთავსებული ღილაკიდან ChemSk (ნახ. 39) გამოვიძახოთ პროგრამა ChemSketch და ავაგოთ 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპან-1-ოლის ორგანოზომილებიანი სტრუქტურა, როგორც მოცემულია § 3.2. (გვ.37). აგების დასრულების შემდეგ გავააქტიუროთ ღილაკი Copy to 3D (კოპირება 3D-ში). ეკრანზე ხელახლა ჩაიტვირთება პროგრამა 3D Viewer, რომელიც 2-მეთილ-3-ნიტრო-პროპან-1-ოლს

წარმოგვიდგენს სამგანზომილებიანი სტრუქტურის სახით (ნახ. 40).

პროგრამა 3D Viewer-ის საშუალებით შესაძლებელია წარმოდგენილი სამგანზომილებიანი სტრუქტურის ზომების ცვლილება. მენიუს Options (არჩევანი) ბრძანება Increase by 5% radii (რადიუსის 5%-ით გადიდება) ემსახურება სტრუქტურის გადიდებას 5%-ით. ანალოგიური ეფექტი აქვს თავუნას ღილაკის დაწკაპუნებას შესაბამისი ბრძანების

პიქტოგრამაზე აღნიშნულ პიქტოგრამაზე ყოველი დაწკაპუნება სტრუქტურას გაზრდის 5%-ით. საპირისპირო მოქმედება გააჩნია ბრძანებას Decrease by 5% radii (რადიუსის 5%-ით შემცირება), რომელიც იმავე მენიუში არის

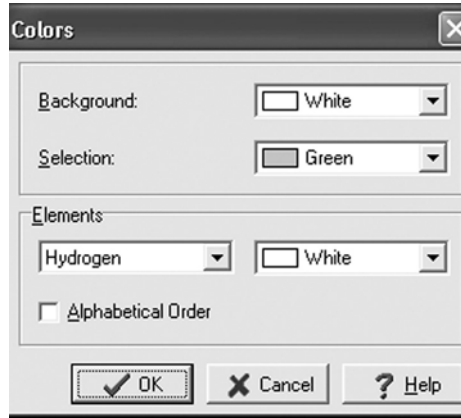
მოთავსებული. მისი შესაბამისი პიქტოგრამა კი არის .

აგებული სტრუქტურის თავისუფალი შემობრუნება სივრცეში შესაძლებელია თავუნას საშუალებით. დავაჭიროთ მარცხენა ღილაკს და თითის აულებლად ვამოძრავოთ თავუნა სასურველი მიმართულებით. ჩვენი ყოველი მოძრაობის ადეკვატურად ეკრანზე შემობრუნდება მოლეკულა. აღნიშნული ოპერაცია სასარგებლოა დიდი ზომის მოლეკულებისათვის, რათა მოხდეს მოლეკულის „დათვალიერება“ ყოველი მხრიდან. დიდ მოლეკულებში ხშირად უკანა პლანზე განთავსებული ატომები არ ჩანს. თუ გავააქტიურებთ ბრძანებას Auto Rotate (ავტომატური ბრუნვა), რომელიც მოთავსებულია მენიუში Tools (მოწყობილობები), მაშინ მოლეკულა დაიწყებს თავისუფალ ბრუნვას შემთხვევითი მიმართულებებით. იმავე მენიუში განთავსებული ბრძანება Auto Rotate & Change Style (ავტომატური ბრუნვა და სტილის ცვლილება) იწვევს მოლეკულის თავისუფალ ბრუნვასა და სტრუქტურის გამოსახვის ფორმის ცვლილებას.

ეკრანზე გამოსახული სამგანზომილებიანი სტრუქტურის აღქმას სპეციალური „მიჩვევა“ ესაჭიროება. სამგანზომილებიანი სტრუქტურულ მოდელებზე ელემენტების გარჩევა ძირითადად წარმოებს ფერების მიხედვით. ნახშირბადის ატომი გამოისახება ცისფერი ფერით, წყალბადი – თეთრით,

ჟანგბადი - წითელით, აზოტი - ლურჯით, გოგირდი წითელით, ჰალოგენები - ვერცხლისფერით და ა. შ.

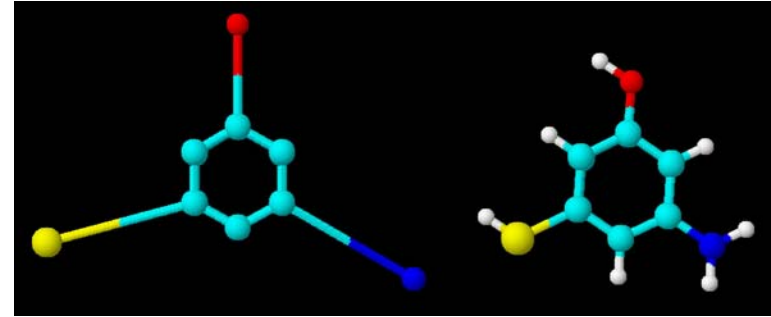
მომხმარებელს აქვს საშუალება თავისი სურვილის მიხედვით ცვალოს ელემენტების გამოსახვის ფერი. ამისათვის გამოიყენება ბრძანება **Colors** (ფერები), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Options** (არჩევანი). აღნიშნული ბრძანების გააქტიურების შემთხვევაში ეკრანზე გამონათდება დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 42), რომელიც ორ ჩარჩოს მოიცავს. ზედა ჩარჩოს საშუალებით წარმოებს ფერის შერჩევა მოდელის ფანჯრის ფონისათვის (Background) და მონიშნული (Selection) ობიექტის ფერისათვის. უშუალოდ ფერის შერჩევა წარმოებს მათ მარჯვნივ მოთავსებული ჩამოსაშლელი ფანჯრებიდან.



ნახ. 42. ელემენტების ფერის შერჩევის დიალოგის ფანჯარა პროგრამა 3D Viewer-ში

წარმოებს ელემენტის შერჩევა. ნუსხაში ელემენტები დალაგებულია რიგობრივი ნომრის მიხედვით. თუ ჩავრთავთ ჩამორთველს **Alphabeical Order** (ანბანური რივი), მაშინ ელემენტები ანბანის მიხედვით დალაგდებიან. მარჯვნივ მოთავსებული ჩამოსაშლელი ფანჯარის დანიშნულებაა ფერის შერჩევა. აქვე აღვნიშნავთ, რომ ელემენტის ვარიანტების შესაბამისად იცვლება ფერიც, რაც საშუალებას გვაძლევს გავცნოთ ამა თუ იმ ელემენტს რომელი ფერი შეესაბამება. თუ ჩვენ შევცვლით ფერს, მაშინ მას მანქანა დაიმანჯრებს და შემდგომი სტრუქტურების აგებისას ეს ფერი იქნება გამოყენებული.

აგებული სამგანზომილებიანი სტრუქტურის რეალურ სტრუქტურასთან უკეთესი მიახლოების მიზნით საჭიროა მისი ოპტიმიზაცია. ოპტიმიზაციის მიღწევა შესაძლებელია



ნახ. 43. არაოპტიმიზირებული (მარცხნივ) და ოპტიმიზირებული (მარჯვნივ) ერთი და იგივე სტრუქტურა

ბრძანების **3D Optimization** (3D ოპტიმიზაცია) გამოყენებით, რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Tools** (მოწყობილობები).

აღნიშნული ბრძანების ტოლფასოვანია ლილაკზე დაწკაპუნება. ოპტიმიზაციის შემდეგ სტრუქტურას დაემატება წყალბადატომები და ქიმიური ბმების სიგრძეები და ბმის კუთხეები გაუტოლდება თეორიულ მნიშვნელობებს. ნახ. 43-ზე მარცხენა მოდელი შეესაბამება არაოპტიმიზირებულ სტრუქტურას, ხოლო მარჯვნივ მოცემულია იგივე მოლეკულის მოდელი, რომელიც მიიღება ოპტიმიზაციის შედეგად. შევნიშნოთ, რომ ოპტიმიზირებულ სტრუქტურას დამატებული აქვს წყალბადატომებიც.

## 5.2. 3D-ბრაფიკული სტრუქტურების აგება CHEM 3D-ს საშუალებით

სამგანზომილებიანი სტრუქტურების აგების ასევე მძლავრი საშუალება არის პროგრამული პაკეტი Chem Office, კერძოდ კი ამ პაკეტში შემავალი პროგრამა Chem 3D. იგი შექმნილია სპეციალურად მოლეკულების მოდელირებისათვის. აღნიშნული პროგრამა აერთიანებს სამგანზომილებიანი

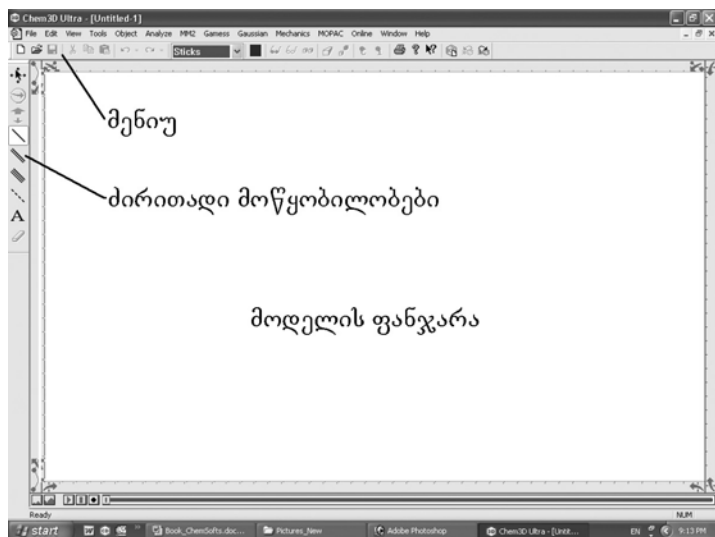
სტრუქტურის აგების, მისი ანალიზისა და გაანგარიშებების საშუალებებს. ანალიზისა და გამოთვლითი ქიმიის საწყისები განხილული იქნება შემდეგ თავებში (იხ. თავი 7.). ამჟამად გავეცნოთ მხოლოდ სამგანზომილებიანი სტრუქტურების აგების მეთოდებს.

პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 44-ზე. იგი შედგება მოდელის ფანჯარის, მენიუს, ძირითადი მოწყობილობების პალიტრისა და სხვა დამხმარე ღილაკებისაგან.

პროგრამა Chem 3D-ში სამგანზომილებიანი სტრუქტურის აგება შესაძლებელია სამი მეთოდით.

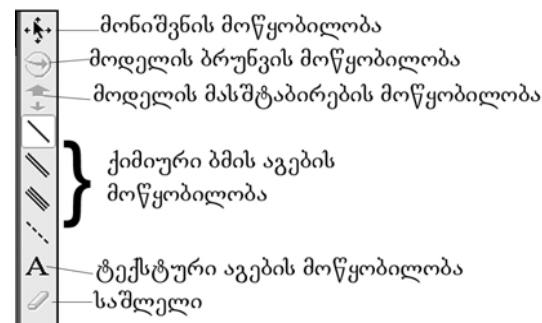
**პირველი მეთოდი** ყველაზე მარტივი მეთოდია და გამოიყენება მარტივი სტრუქტურების ასაგებად. აგებისათვის გამოიყენება ტექსტური აგების მოწყობილობა. იგი მოთავსებულია ძირითადი მოწყობილობების პალიტრაზე (ნახ. 45).

ტექსტური აგების მოწყობილობის არჩევის შემდეგ დავაწკაპუნოთ მოდელის აგების ფანჯარაში. ეკრანზე გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა. ჩაწეროთ მასში



ნახ. 44. პროგრამა Chem 3D-ს ინტერფეისი

სტრუქტურული ფორმულა და დასასრულს დავაწკაპუნოთ ღილაკს Enter. მოდელის ფანჯარაში გაქრება „ტექსტური“ ფორმულა



ნახ. 45. პროგრამა Chem3D-ს ძირითადი მოწყობილობების პალიტრა

და მის ნაცვლად აიგება სამგანზომილებიანი მოდელი. ტექსტურ ფანჯარაში სტრუქტურული ფორმულის ჩაწერას გარკვეული კანონზომიერების დაცვა სჭირდება, რათა მანქანამ იგი კორექტულად აღიქვას და ააგოს შესაბამისი სამგანზომილებიანი მოდელი. მაგალითად, ბენზოლის მოლეკულის აგებისათვის გამოიყენება „C6H6“, ტოლუოლის - „C6H5CH3“, ციკლოპენტანის - „(CH2)5“ და ა.შ. ადვილი მისახვედრია, რომ შედარებით რთული სტრუქტურის მოდელის აგება აღნიშნული მეთოდით ძლიერ გაჭირდება და მთელ რიგ შემთხვევებში შეუძლებელიც იქნება.

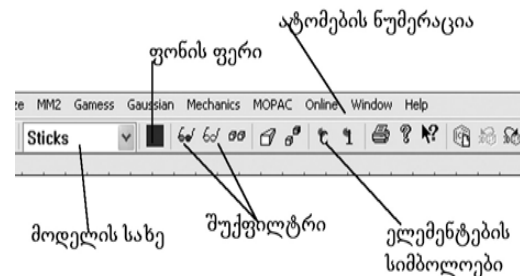
**მეორე მეთოდით** სტრუქტურის მოდელის ასაგებად გამოიყენება ქიმიური ბმების მოწყობილობები. ანილინის მოლეკულის ასაგებად ძირითადი მოწყობილობების პალიტრიდან მონაცვლეობით ავირჩიოთ ორმაგი და ერთმაგი ბმის აგების მოწყობილობა და მათი საშუალებით ავაგოთ „ექვსკუთხედი“. მიღებული სტრუქტურა იქნება ბენზოლის მოდელი. კვლავ ავირჩიოთ ერთმაგი ბმის აგების მოწყობილობა და ბენზოლის მოლეკულის ნებისმიერ ნახშირბადატომთან დავაკავშიროთ. მიღებული ტოლუოლის მოლეკულა რომ გარდაიქმნას ანილინის მოლეკულად, საჭიროა გვერდით ჩონჩხში არსებული ნახშირბადატომი (უკანასკნელად აგებული) შეიცვალოს აზოტის ატომით. ამისათვის ავირჩიოთ ტექსტური აგების მოწყობილობა და მივუახლოვოთ იგი მას. კურსორთან გამონათდება პატარა შეტყობინების ფანჯარა,

რომელიც აღწერს ატომის გვარობასა (ნახშირბადი, წყალბადი, აზოტი და ა.შ.) და ბუნებას (მაგ. სპირტული წყალბადი, ამინის წყალბადი, არომატული წყალბადი და ა.შ.). დავაწკაპუნოთ ერთხელ. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა და მასში შევიტანოთ სიმბოლო N. მეთილის რადიკალი გარდაიქმნება ამინის რადიკალად.

**მესამე მეთოდი** წარმოადგენს სამგანზომილებიანი სტრუქტურის აგების ირიბ მეთოდს. ანუ ჯერ აიგება ორგანოზომილებიანი სტრუქტურა, ხოლო შემდეგ მის საფუძველზე სამგანზომილებიანი. ორგანოზომილებიანი მოდელის აგება წარმოებს პროგრამაში ChemDraw, როგორც ეს აღწერილი იყო წინა თავებში (იხ. § 3.1., გვ. 30). მოდელის აგების შემდეგ მოვნიშნოთ სტრუქტურა და გავააქტიუროთ ბრძანება **Copy** (კოპირება), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Edit** (რედაქტირება). ამის შემდეგ გავუშვათ პროგრამა Chem 3D და გავააქტიუროთ ბრძანება **Paste** (ჩაწებება). ბუფერულ მეხსიერებაში დამახსოვრებული ორგანოზომილებიანი მოდელი Chem 3D-ში აიგება სამგანზომილებიანად.

### 5.3. ტრანსფორმაციები სამგანზომილებიან მოდელებზე

სამგანზომილებიანი სტრუქტურები შესაძლებელია წარმოდგენილი იქნას სხვადასხვა ფორმით. მოდელის გამოსახვის ფორმის ვარირება წარმოებს ჩამოსაშლელი ნუსხიდან (ნახ. 46). სტრუქტურა შესაძლებელია წარმოდგენილი იქნას ჩარჩოს (Wire Frame), წკირების (Sticks), ბირთვებისა და წკირების (Ball & Sticks), ცილინდური ბმების (Cylindrical Bonds) და შევსებული სივრცის (Space Filling) სახით.



ნახ. 46. პროგრამა Chem 3D-ს ბრძანებების პიქტოგრამები

მოდელის ფანჯრის ფონი ავტომატურად აღებულია ლურჯი ფერის, თუმცა მისი ცვლილება მომხმარებელს შეუძლია შესაბამის ღილაკზე დაწკაპუნებით (ნახ. 46). ასევე, მოდელის ჩვენებისას შესაძლებელია სპეციალური შუქფილტრების გამოყენება, რომელთა ჩართვა და გადართვა წარმოებს შესაბამისი ღილაკებზე დაწკაპუნებით (ნახ. 46). სამგანზომილებიან მოდელზე ატომების გვარობის გარჩევა ძირითადად წარმოებს ფერების მიხედვით. მაგრამ ფერთა გამის სიმცირის გამო ელემენტების რაოდენობასთან შედარებით, მრავალი ატომი ერთი და იგივე ფერით გამოისახება. ასეთ შემთხვევაში აუცილებელი ხდება ატომბირთვებზე შესაბამისი სიმბოლოების დატანა, რომელიც შესაძლებელია მარტივად განხორციელდეს შესაბამის ღილაკზე დაწკაპუნებით (ნახ. 46). პროგრამა Chem 3D მოთხოვნილების მიხედვით მოლეკულაში შემავალი ატომების ავტომატური ნუმერაციის საშუალებას იძლევა, მაგრამ უნდა აღინიშნოს, რომ ეს ნუმერაცია არ ემთხვევა IUPAC-ის მიერ შემოღებულ ნუმერაციას.

აგებული სტრუქტურა შესაძლებელია ოპტიმიზირებული იქნას სხვადასხვა მეთოდების გამოყენებით. ყველაზე უმარტივესი მეთოდი არის ბრძანების **Clean up structure** (სტრუქტურის „გასუფთავება“) გამოყენება მენიუდან **Tools** (მოწყობილობები). აღნიშნული ბრძანების შემდეგ მოლეკულის მოდელში ყველა ბმისა და ბმებს შორის კუთხის მნიშვნელობა გაუტოლდება თეორიულ მნიშვნელობას, რის შემდეგაც მოდელი შედარებით უფრო უკეთ „გამოიყურება“.

მაგრამ აღნიშნული ოპტიმიზაცია არ არის სრულფასოვანი, ვინაიდან ამ დროს არ ხდება ატომთაშორისი ურთიერთგავლენების გათვალისწინება. ამ უკანასკნელის შესრულებისათვის საჭიროა განხორციელდეს კვანტურ-მექანიკური გაანგარიშებები.

სამგანზომილებიანი სტრუქტურის სივრცეში ტრანსფორმაციებისათვის გამოიყენება მენიუს ბრძანებები და ძირითადი პალიტრის მოწყობილობები. სიბრტყეების მიმართ გარდასახვისათვის გამოიყენება ქვემენიუ **Reflect** (*ასახვა*), რომელიც შედის მენიუში **Tools** (*მოწყობილობები*). სიბრტყის მიმართ ასახვის ბრძანებები მოცემულია ცხრილის სახით:

| მენიუს ბრძანება           | დანიშნულება                      |
|---------------------------|----------------------------------|
| Reflect through Y-Z plane | გადსახვა Y-Z სიბრტყის მიმართ     |
| Reflect through X-Z plane | გადსახვა X-Z სიბრტყის მიმართ     |
| Reflect through X-Y plane | გადსახვა X-Y სიბრტყის მიმართ     |
| Invert through origin     | საკუთარი თავის მიმართ გარდასახვა |

პროგრამა Chem 3D ასევე საშუალებას იძლევა აგებული სამგანზომილებიანი მოდელი სივრცეში შემობრუნებული იქნას ნებისმიერი კუთხით. ამისათვის არსებობს რამოდენიმე საშუალება. მოლეკულის თავისუფალი ბრუნვისათვის უნდა გააქტიურდეს შებამისი მოწყობილობა. თავისუფალი ბრუნვის პიქტოგრამაზე თავუნას დაწკაპუნების (ნახ. 45) შემდეგ კურსორი იღებს ხელის ფორმას. თავუნას მარცხენა ღილაკზე დაჭერილ მდგომარეობაში მოძრაობისას მოდელის გარშემო ჩნდება რკალი, რომელშიც მოდელი განიცდის თავისუფალ ბრუნვას თავუნას გადაადგილების შესაბამისად.

მოდელის გარკვეული კუთხით ვერტიკალური ღერძის გარშემო შემობრუნება შესაძლებელია შესაბამის ღილაკზე თავუნას ღილაკის დაჭერით და ჰორიზონტალურად გადაადგილებით. აღნიშნული ღილაკი (ნახ. 47) მოთავსებულია მოდელის ფანჯრის მარცხენა ქვედა კუთხეში. ანალოგიური დანიშნულება, მაგრამ ვერტიკალური ღერძის მიმართ შემობრუნებას უზრუნველყოფს მსგავსი ღილაკი, რომელიც მოდელის ფანჯრის მარჯვენა ქვედა კუთხეშია მოთავსებული. მოდელის შემობრუნება ვერტიკალური ღერძის გარშემო ხდება ანალოგიურად, მაგრამ ამ დროს გამოიყენება მოდელის ფანჯრის მარჯვენა ზედა და ქვედა კუთხეში მოთავსებული ღილაკები.

ზოგიერთ შემთხვევაში საჭიროა არა მთლიანი



მოდელის ვერტიკალური ღერძის გარშემო გარკვეული კუთხით შემობრუნების ღილაკი



მოდელის ჰორიზონტალური ღერძის გარშემო გარკვეული კუთხით შემობრუნების ღილაკი



მოდელის შემობრუნება გარკვეული ბმის მიმართ



მოდელის გარკვეული ფრაგმენტის შემობრუნება რომელიმე ბმის მიმართ

ნახ. 47. მოდელის ბრუნვის ღილაკები პროგრამა Chem 3D-ში.

მოლეკულის, არამედ მისი ცალკეული ფრაგმენტის შემობრუნება. ასეთ შემთხვევაში გამოიყენება მოდელის ბმის მიმართ შემობრუნების მოწყობილობა (ნახ. 47). მაგრამ უნდა აღინიშნოს, რომ აღნიშნული მოწყობილობა აქტიურია მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ მოდელის რომელიმე ბმა არის მონიშნული.

ნახ. 47-ზე მოყვანილ ღილაკებზე თავუნას ორჯერადი სწრაფი დაწკაპუნებით აქტიურდება ახალი დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც შესაძლებელია შემოსაბრუნებელი კუთხის რიცხვითი მნიშვნელობის შეტანა.

სამგანზომილებიანი მოდელის ზომის ვარირება შესაძლებელია მასშტაბირების ღილაკის გააქტიურებითა (ნახ. 45) და მოდელის ფანჯარაში თავუნას ღილაკის დაჭერით მდგომარეობაში გადაადგილებით. ანალოგიური ეფექტები მიიღწევა F7 და F8 ღილაკების დაჭერით ან **Tools** (მოწყობილობები) მენიუს ბრძანებების **Magnify** (გაზრდა) და **Reduce** (შემცირება) გააქტიურებით.

## 6. მარტივი საანბარიშო პროგრამები

არსებობს უამრავი პროგრამა, რომელნიც განკუთვნილი არიან მარტივი ქიმიური გაანგარიშებებისათვის. მრავალი მათგანის გაანგარიშების შესრულება შესაძლებელია ხელითაც, მაგრამ კომპიუტერული გადაწყვეტილება ანგარიშს უფრო სწრაფს და მოხერხებულს ზდის. აღნიშნული პროგრამების საშუალებით წარმოებს რეაქციის სტექიომეტრიული კოეფიციენტების გაანგარიშება, ხსნარის კონცენტრაციის დადგენა ან სასურველი კონცენტრაციის ხსნარის მომზადება, pH-ის მნიშვნელობის ანგარიში და ტიტრაციაზე დახარჯული ნივთიერების რაოდენობა და სხვა.

### 6.1. მოლეკულური მასის განსაზღვრა

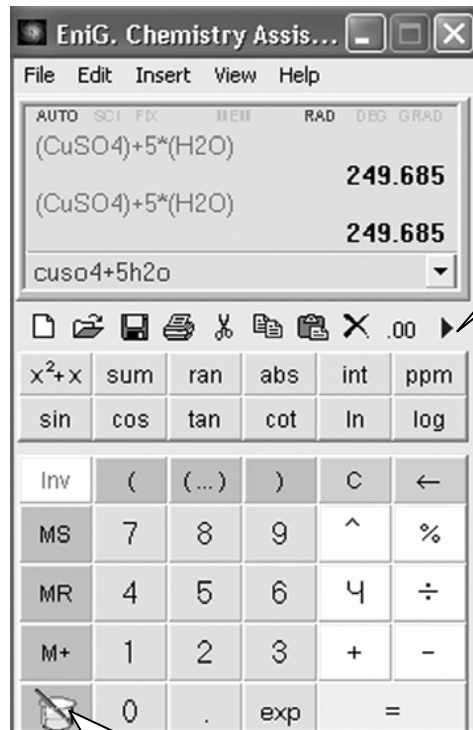
იგი ერთ-ერთი ყველაზე უმარტივესი ამოცანაა. მისი გადაჭრისათვის არსებობს უამრავი პროგრამა, რომელთა უდიდესი ნაწილი სამოყვარულო დონეზე არის დაწერილი. ერთ-ერთი ყველაზე ცნობილი პროგრამა არის MolWeighter და EniG. Chemistry Assistant, რომელიც მოლეკულური ფორმულის შეტანის შემდეგ ანგარიშობს მოლეკულურ მასას. მაგრამ მის ნაკლოვან მხარეს წარმოადგენს ის, რომ მოლეკულის შეტანა შესაძლებელია მხოლოდ ბრუტო-ფორმულის სახით. მასში შეუძლებელია ნაერთების სტრუქტურული ფორმულებზე გაანგარიშებების განხორციელება.

მოლეკულური მასის გაანგარიშების განხორციელება შესაძლებელია ჩვენთვის ცნობილი ისეთი დიდ პროგრამების საშუალებით, როგორცაა ChemSketch და ChemDraw. მათ შეუძლიათ მოლეკულური მასა იანგარიშონ ნაერთისათვის, რომელიც მოცემულია როგორც ბრუტო, ისე სტრუქტურული სახით.

### 6.1.1. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამის EniG. Chemistry Asissytant საშუალებით

პროგრამა EniG.Chemistry Asissytant წარმოადგენს ტიპიურ კალკულატორს, რომელსაც დამატებული აქვს როგორც მათემატიკური (ალგებრული, ტრიგონომეტრიული, სტატისტიკური), ისე ქიმიური ფუნქციები.

მისი საშუალებით მოლეკულური მასის გაანგარიშებისათვის საკმარისია ნაერთის ბრუტო ფორმულის ჩაწერა. მაგალითად, ვთქვათ უნდა ვიანგარიშოთ შაბიამნის  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (სპილენძის სულფატის პენტაჰიდრატის) მოლე-



საინჟინრო  
კალკულა-  
ტორის  
გადასართა-  
ვი

სსნარების კონცენტრაციის  
ანგარიშის მოწყობილობა

ნახ. 48. პროგრამა  
EniG.Chemistry  
Assistant-ის  
ინტერფეისი

კულური მასა. ინფორმაციის შეტანის ფანჯარაში ჩავწერთ შემდეგი ტექსტი: „ $\text{CuSO}_4 + 5\text{H}_2\text{O}$ “. მანქანა ელემენტის სომბოლოებს შეცვლის მათი შესაბამისი ატომური მასებით და შემდეგ განახორციელებს არითმეტიკულ ოპერაციებს. მიღებული შედეგი აღიბეჭდება ტაბლოზე. შესაძლებელია მისი ტექსტური ფორმატის ფაილის სახითაც შენახვა თუ გავააქტიურებთ შენახვის შესაბამის ბრძანებას **Save (შენახვა)** მენიუდან **File (ფაილი)**.

### 6.1.2. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამა Chem Sketch-ის საშუალებით

პროგრამა ChemSketch საშუალებას იძლევა ნაერთის მოლეკულური მასა გაანგარიშებული იქნას სტრუქტურული ფორმებისათვის.

ავაგოთ ანილინის სტრუქტურული ფორმულა პროგრამაში ChemSketch (იხ. § 3.2., გვ. 37). თუ ეკრანზე მოდელის რამოდენიმე სტრუქტურაა, მაშინ აუცილებელია საკვლევი მოდელის მონიშვნა. მონიშვნის შემდეგ გავააქტიურებთ ბრძანება **Formula Weight (ფორმულის მასა) Tools (მოწყობილობები)** მენიუს **Calculate (ანგარიში)** ქვემენიუდან. ბრძანების გაცემის შემდეგ ეკრანზე გამოვა დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც მოცემული იქნება საკვლევი სტრუქტურის მოლეკულური მასა. ნაანგარიშები მოლეკულური მასის მოდელის ეკრანზე დასათანად საკმარისია ანგარიშის დიალოგის ფანჯრის ლილაკის **Copy to editor (კოპირება რედაქტორში)** გააქტიურება.



## 6.2. რეაქციის სტექიომეტრიული კოეფიციენტების ანგარიში

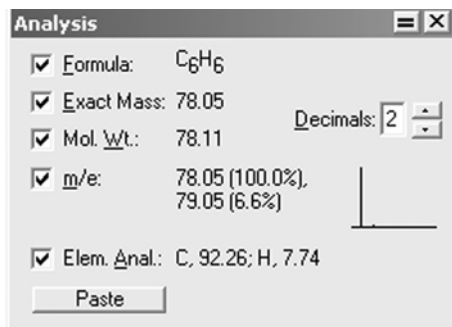
რეაქციის სტექიომეტრიული კოეფიციენტების ანგარიში შესაძლებელია განხორციელდეს პროგრამა TableRus-ის საშუალებით. აღნიშნული პროგრამის ინტერფეისი აღწერილი იყო პარაგრაფში 2.1. (გვ. 9).

გავააქტიურთ ბრძანება **Химический калькулятор** (ქიმიური კალკულატორი), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Команды** (ბრძანებები). ეკრანზე გამოვა ახალი დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 50), რომელიც მოიცავს ბრძანებების ღილაკებს, ქიმიური რეაქციის განტოლების სიმბოლოებს (+, = და ა.შ.), ქიმიურ ელემენტებს, რომელნიც განლაგებულია მოკლეპერიოდული პერიოდული სისტემის მსგავსად, და ინდექსებს.

### 6.1.3. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამის Chem Draw საშუალებით

ავაგოთ მოლეკულის სტრუქტურული ფორმულა ისე, როგორც ზემოთაა აღნიშნული (იხ. § 3.1., გვ. 30).

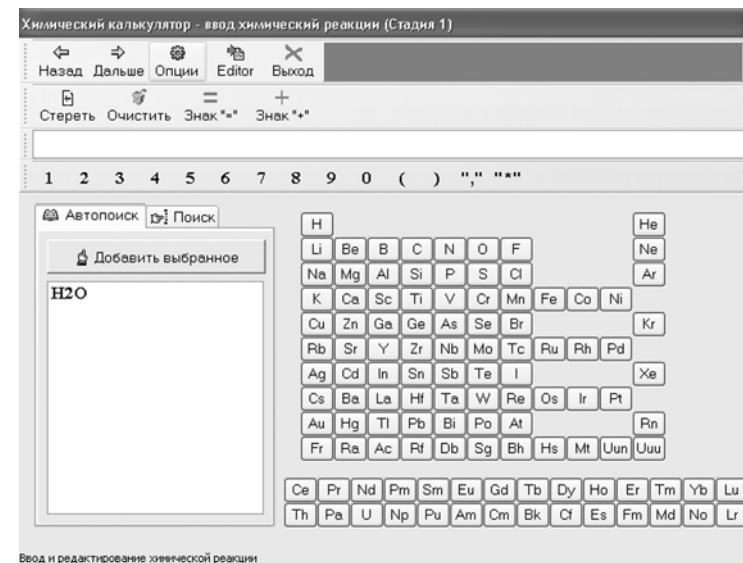
მოვნიშნოთ სტრუქტურა და გავააქტიუროთ ბრძანება **Show analysis window** (ანალიზის ფანჯრის ჩვენება). ეკრანზე გამონათდება დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 49), რომელიც მოიცავს ბრუტო ფორმულას (Formula), მიახლოებით მასას (Exact Mass), მოლეკულურ მასას (Mol Wt), მას-სპექტრის პიკების მდებარეობას (m/e) და სპექტრს, ელემენტურ ანალიზს (Elem. Anal.). ანალიზის დიალოგის ფანჯარაში მოცემული მონაცემების გადასატანად მოდელის ფანჯარაში საჭიროა გააქტიურდეს ღილაკი **Paste** (ჩაწებება). ამასთანავე, ანგარიშის შედეგებიდან შესაძლებელია სამუშაო მაგიდაზე გადასატანი მონაცემების შერჩევა. ანალიზის დიალოგის ფანჯარაში მოცემული ანგარიშის თითოეულ ოფციას წინ აქვს მონიშნვის მოწყობილობა. შედეგების ტრანსპორტირებისას გადავა ის მონაცემები, რომელთა წინ იქნება მონიშნვის ნიშანი.



ნახ. 49. ანალიზის დიალოგის ფანჯარა პროგრამაში Chem Draw

(Exact Mass), მოლეკულურ მასას (Mol Wt), მას-სპექტრის პიკების მდებარეობას (m/e) და სპექტრს, ელემენტურ ანალიზს (Elem. Anal.). ანალიზის დიალოგის ფანჯრის საშუალებით შესაძლებელია მოლეკულური მასის ანგარიშის სიზუსტის ვარიაცია, კერძოდ მძიმის შემდეგ ციფრების რაოდენობის ცვლილება. მოლეკულური მასის მეათასედი სიზუსტით ანგარიშისათვის ჩაწერეთ ციფრი 3 ტექსტურ ფანჯარაში

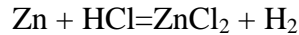
**Decimals** (მეათედები). ანალიზის ფანჯარაში მოცემული მონაცემების გადასატანად მოდელის ფანჯარაში საჭიროა გააქტიურდეს ღილაკი **Paste** (ჩაწებება). ამასთანავე, ანგარიშის შედეგებიდან შესაძლებელია სამუშაო მაგიდაზე გადასატანი მონაცემების შერჩევა. ანალიზის დიალოგის ფანჯარაში მოცემული ანგარიშის თითოეულ ოფციას წინ აქვს მონიშნვის მოწყობილობა. შედეგების ტრანსპორტირებისას გადავა ის მონაცემები, რომელთა წინ იქნება მონიშნვის ნიშანი.



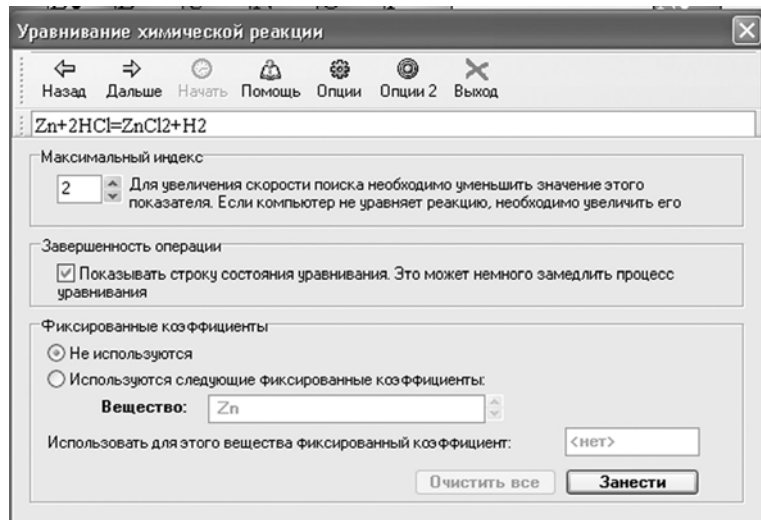
ნახ. 50. ქიმიური რეაქციის კალკულატორი, პროგრამა TableRus

ქიმიური რეაქციის აკრეფა წარმოებს თაგუნას დაწკაპუნებით შესაბამის სიმბოლოებზე. აუცილებელია, რეაქციის ჩანაწერს ჰქონდეს განტოლების სახე.

მაგალითის სახით განვიხილოთ რეაქცია:



1. თავუნას კურსორის საშუალებით შევიტანოთ შესაბამისი სიმბოლოები ისე, რომ რეაქციის ჩანაწერმა ზევით ნაჩვენები განტოლების სახე მიიღოს.
2. შემდეგ გავაქტიუროთ ღილაკი **Дальше** (შემდეგ)
3. ეკრანზე გამონათდება ახალი ფანჯარა და კვლავ გავააქტიუროთ ღილაკი **Дальше** (შემდეგ)
4. მანქანა რამოდენიმე წამის განმავლობაში ახორციელებს გაანგარიშებას და ანგარიშის შედეგებს წარმოადგენს ახალი დიალოგის ფანჯრის საშუალებით (ნახ. 51).
5. მანქანა გაანგარიშების სიზუსტისათვის იყენებს ე.წ. რეაქციის უმაღლესი სტექიომეტრიული კოეფიციენტის მნიშვნე-



ნახ. 51. ქიმიური რეაქციის განტოლების სტექიომეტრიული კოეფიციენტების გაანგარიშების შედეგების წარმოადგენის დიალოგის ფანჯარა

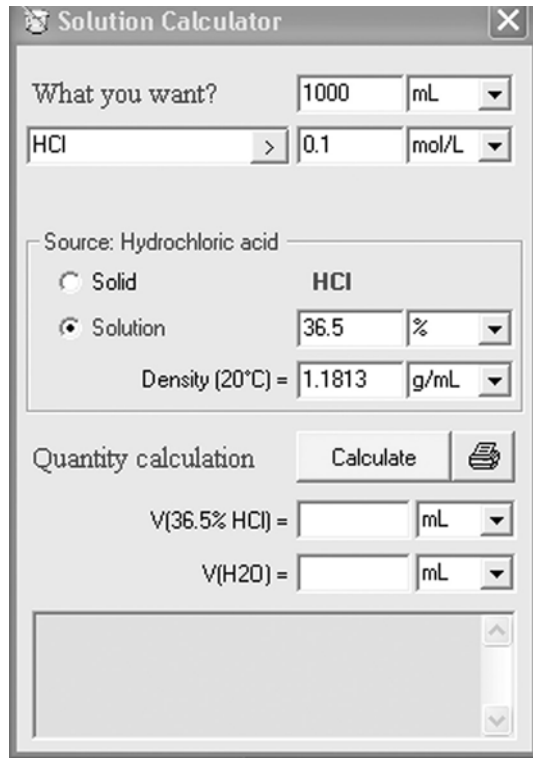
ნელობას. რაც უფრო დიდია აღნიშნული კრიტერიუმი, მით უფრო ზუსტი იქნება ანგარიშის შედეგი. მაგრამ უნდა გავითვალისწინოთ ის გარემოებაც, რომ მისი დიდი მნიშვნელობა ზრდის ანგარიშის დროს. აღნიშნული კრიტე-

რიუმის პირველი გაანგარიშებისას ავტომატურად გამოითვლება, მაგრამ თუ ანგარიშის შედეგი არ იქნება სწორი, საჭიროა მისი გაზრდა.

### 6.3. ხსნარის კონცენტრაციის გაანგარიშება

ხსნარის კონცენტრაციის გაანგარიშება შესაძლებელია განორციელებულ იქნას პროგრამის EniG. Chemistry Assistant საშუალებით. პროგრამის ინტერფეისი მოცემულია ნახ. 48-ზე. კალკულატორის კლავიატურის ქვედა მარჯვენა ღილაკი წარმოადგენს ხსნარის კონცენტრაციის კალკულატორს. მასზე თავუნას ღილაკის დაწკაპუნება ააქტიურებს ახალ ფანჯარას (ნახ. 52). გრაფაში **What you want** (რა გსურთ?) უნდა შევიტანოთ საკვლევი ნივთიერების ბრუტო ფორმულა ან ავირჩიოთ იგი მონაცემთა ბაზიდან, რისთვისაც უნდა დაავაწვეთ გრაფის მარჯვნივ მოთავსებულ ისარზე. გრაფის **What you want** მარჯვნივ მოთავსებულია ორი გრაფა, რომლებშიც მითითებული უნდა იქნას მოსამზადებელი ხსნარის რაოდენობა და კონცენტრაცია. პარალელურად, მათ მარჯვნივ მოთავსებული ჩამოსაშლელი ნუსხებიდან უნდა შეირჩეს შესაბამისი სიდიდეების განზომილებებიც. ჩარჩო **Source** (წყარო) განკუთვნილია გასახსნელი ნივთიერების აგრეგატული მდგომარეობის მითითებისათვის. თუ აღებული ნაერთი მყარია, მაშინ სელექტორი უნდა გადავრთოთ ბრძანებაზე **Solid** (მყარი), ხოლო თუ თხევადია, მაშინ - ბრძანებაზე **Solution** (ხსარი). ამ უკანასკნელის გააქტიურების შემთხვევაში ეკრანზე გამოჩნდება დამატებითი ტექსტური უჯრები, რომელნიც განკუთვნილი არიან საწყისი ხსნარის კონცენტრაციისა და სიმკვრივის (**Density**) მისათითებლად. საწყისი მონაცემების სრულად მითითების შემდეგ გავააქტიუროთ ღილაკი **Calculate** (ანგარიში). საკვლევი ხსნარის კონცენტრაცია და და მისი მომზადების მეთოდისა მოცემული იქნება ჩარჩოში **Quantity calculation** (ანგარიშის შედეგი).

მაგალითის სახით განვიხლოთ კონკრეტული ამოცანა. ვთქვათ, 98%-იანი გოგირდმჟავიდან უნდა მოვამზადოთ 100



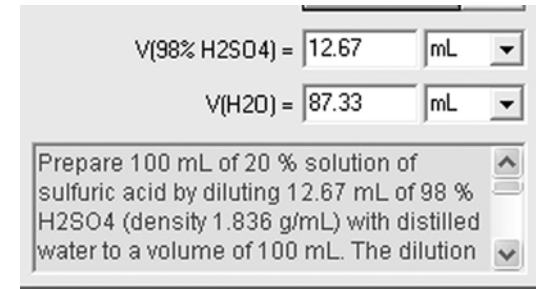
ნახ. 52. ხსნარის კონცენტრაციის კალკულატორი

მლ 20%-იანი ხსნარი.

1. გრაფაში **What do you want?** (რა გსურთ?) ჩავწეროთ გოგირდმჟავის ბრუტო ფორმულა  $H_2SO_4$  ან ავირჩიოთ მონაცემთა ბაზიდან თავუნას ღილაკის დაჭერით მარჯვნივ გასახსნელი ცხრილიდან.
2. ხსნარის რაოდენობის გრაფაში შევიტანოთ „100“
3. განზომილება დავტოვოთ mL
4. კონცენტრაციის გრაფაში შევიტანოთ „20“
5. განზომილება დავტოვოთ „%“

6. ჩარჩოდან **Source** (წყარო) ავირჩიოთ სელექტორი **Solution** (ხსნარი).
7. შესაბამის გრაფაში შევიტანოთ აღებული ხსნარის კონცენტრაცია „98“.
8. განზომილება დავტოვოთ „%“
9. გავაქტიუროთ ღილაკი **Calculate** (ანგარიში)

ანგარიშის შედეგები გამოჩნდება მოცემული ქვედა ჩარჩოში:



#### 6.4. ნაერთის ფიზიკურ-ქიმიური კონსტანტების ანგარიში

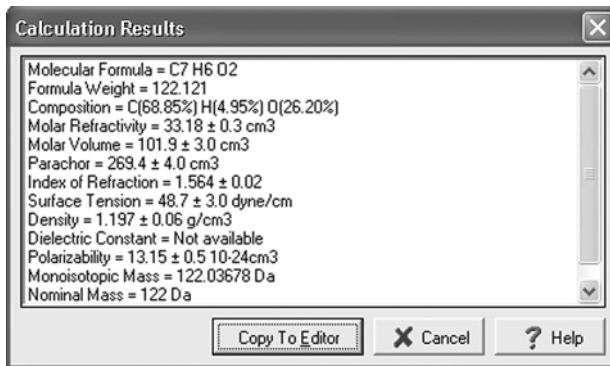
ისეთი ფიზიკურ-ქიმიური კონსტანტების გაანგარიშება, როგორებიცაა მოლეკულური რეფრაქცია, მოლური მოცულობა, პარაქორი, რეფრაქციის მნიშვნელობა, ზედაპირული დაჭიმულობა, სიმკვრივე, დიელექტრიკული შეღწევადობა და პოლარიზებადობა შესაძლებელია მარტივად იქნას გათვლილი პროგრამის ChemSketch-ის საშუალებით. აღნიშნული პარამეტრების გაანგარიშებისათვის:

1. ავაგოთ ბენზომჟავას ორგანზომილებიანი სტრუქტურა (იხ. 3.2., გვ. 37)
2. პროგრამა გადავიყვანოთ სტრუქტურის (Structure) რეჟიმში (ნახ. 22)
3. გავაქტიუროთ მენიუ **Tools** (მოწყობილობები)

4. გავააქტიუროთ ბრძანება **Calculate** (ანგარიში) და შევარჩიოთ პარამეტრი **All properties** (ყველა თვისება).

სამუშაო ეკრანზე გამოვა ახალი დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 53), რომელშიც ჩამოთვლილი იქნება საკვლევი ნაერთის ფიზიკური პარამეტრები. სტრუქტურის სირთულიდან გამომდინარე, შესაძლებელია, რომელიმე მათგანის ანგარიში არ შედგეს. მაგრამ ამასთანავე უნდა გვახსოვდეს, რომ აღნიშნული პარამეტრები წარმოადგენენ ემპირიული ფორმულების საშუალებით გაანგარიშებულ სიდიდეებს და მათი მშენებლობები ყოველთვის არ ემთხვევა რეალურ მნიშვნელობებს.

ნივთიერების ფიზიკური (ლღობისა და დუღილის ტემპერატურები, კრიტიკული ტემპერატურა, წნევა, მოცულობა) და თერმოდინამიკური (ჯიბსის ენერგია, წარმოქმნის

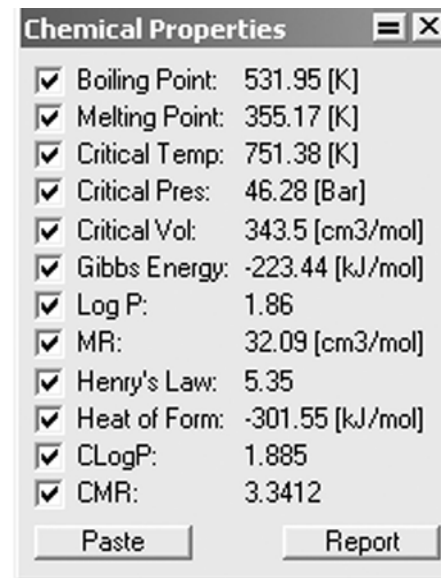


ნახ. 53. ნაერთის თვისებების ანგარიშის დიალოგის ფანჯარა პროგრამაში ChemSketch

სიბოლო და სხვა) მახასიათებლების ანგარიში შესაძლებელია პროგრამის ChemDraw საშუალებით.

1. ავაგოთ ბენზომჟავას სტრუქტურული ფორმულა პროგრამაში ChemDraw (იხ. § 3.1., გვ. 30)
2. მოვნიშნოთ მთლიანი ფორმულა
3. გავააქტიუროთ ბრძანება **Show Chemical Properties Window** (ქიმიური თვისებების ფანჯრის ჩვენება) მენიულან **Show** (ჩვენება).

ეკრანზე გამონათდება ახალი დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 54) რომელშიც მოცემული იქნება ანგარიშის შედეგები. მიღებული შედეგების მოდელის ფანჯარაში დასატანად გავააქტიუროთ დიალოგის ფანჯრის ლალაკი **Paste** (ჩაწებება). ანგარიშის შედეგებზე უფრო ვრცელი ინფორმაციის მისაღებად გავააქტიუროთ ლალაკი **Report** (მოხსენება). ამ უკანასკნელის გააქტიურების შემდეგ გაიხსნება ახალი ტექსტური ფაილი, რომელშიც შედარებით დაწვრილებით იქნება მითითებული ანგარიშის შედეგები და ლიტერატურის წყარო, რის მიხედვითაც წარმოებს ამა თუ იმ შედეგის ანგარიში.



ნახ. 54. ფიზიკური და თერმოდინამიკური თვისებების ანგარიშის შედეგების დიალოგის ფანჯარა

## 6.5. ნაერთების ნომენკლატურა

ნაერთების IUPAC-ის მიხედვით დასახელების მეტად საჭირო და საინტერესო ფუნქციით არის აღჭურვილი რამოდენიმე პროგრამა, რომელთა შორის უნდა აღინიშნოს ChemSketch-v.5.00, Iupac Name Pro, ISIS Draw, ChemDraw.

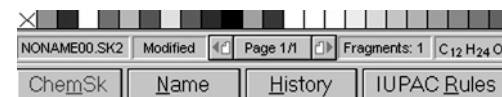
### 6.5.1. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ChemSketch საშუალებით

პროგრამული პაკეტი ACD Labs საშუალებას გვაძლევს დავასახელოთ ნაერთი IUPAC-ის ნომენკლატურის მიხედვით. ACD Labs მიერ შექმნილია ნაერთების ნომენკლატურის დამოუკიდებელი მოდული – დამოუკიდებელი პროგრამა Iupac Name Pro, რომელიც შედის მხოლოდ ლიცენზირებულ პროგრამაში. პროგრამული პაკეტის უფასო 5.00-ე ვერსია აღნიშნულ პროგრამას არ შეიცავს, მაგრამ მისი პატარა მოდული ჩართულია თვით პროგრამაში ChemSketch. ამდენად, აღნიშნული ვერსიის პროგრამა მაინც გვაძლევს ნაერთის დასახელების საშუალებას, თუმცა ნაერთში შემავალი ელემენტების რაოდენობა არ უნდა აღემატებოდეს 50-ს, ხოლო ციკლების რაოდენობა 3-ს.

ავაგოთ 4-ჰიდროქსიბენზომჟავას სტრუქტურული ფორმულა პროგრამაში ChemSketch (იხ. § 3.2., გვ. 37). სტრუქტურის აგებისას აუცილებელია პროგრამის მზა შაბლონების გამოყენება. მაგალითად, ბენზოლის ფრაგმენტი უნდა ავირჩიოთ არომატული სტრუქტურების ბიბლიოთეკიდან (იხ. § 3.4.2., გვ. 46.), ჰიდროქსილის ატომი ელემენტების ძირითადი პალიტრიდან, ხოლო კარბოქსილის ფრაგმენტი რადიკალების ბიბლიოთეკიდან. სტრუქტურის აგების შემდეგ გავააქტიუროთ ბრძანება **Generate Structure from Name** (სახელის გენერირება სტრუქტურიდან), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Tools** (მოწყობილობები). აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ პროგრამა გადართული უნდა იყოს რეჟიმში **Structure** (სტრუქტურა).

პროგრამის მიერ გენერირებული დასახელება ავტომატურად დაიტანება მოდულის ფანჯარაში.

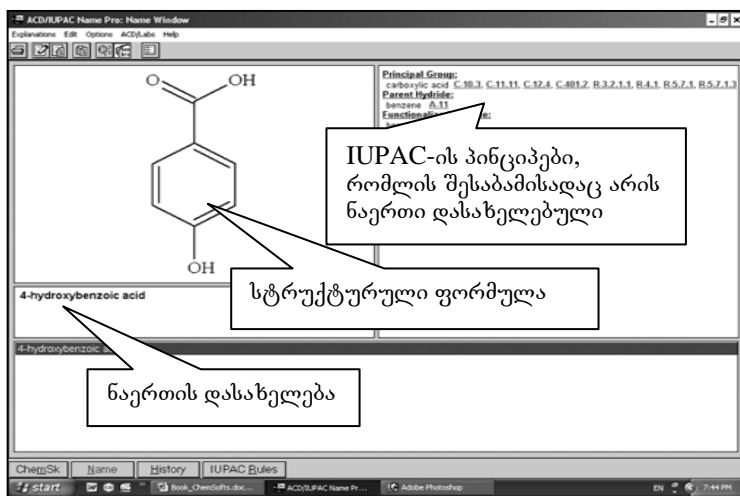
განსხვავებულად ხდება ნაერთის დასახელება ChemSketch-ის სრულფასოვან ვერსიებში. სტრუქტურის აგება მიმდინარეობს ანალოგიურად. ნაერთის აგების შემდეგ ჩატვირთულ უნდა იქნას ნაერთის დასახელების პროგრამა Index Name. მისი გაშვება შესაძლებელია როგორც Start-ის ლილაკიდან (იგი დამოუკიდებელ პროგრამას წარმოადგენს) ან უშუალოდ პროგრამიდან ChemSketch. ამ უკანასკნელ შემთხვევაში უნდა გააქტიურდეს ბრძანება **Index Name**, რომელიც მოთავსებულია მენიუში **ACD/Labs**. პროგრამის Index Name ჩატვირთვის შემდეგ პროგრამას ChemSketch მარცხენა ქვედა კუთხეში გაუჩნდება დამატებითი ლილაკები: **ChemSk**, **Name**, **History**, **IUPAC Rules** (ნახ. 55). ლილაკის **Name** (დასახელება) გააქტიურების შემდეგ გენერირდება ნაერთის დასახელება და მართვა ავტომატურად გადაეცემა პროგრამას Index Name, ხოლო სამუშაო ეკრანს ექნება სახე,



ნახ. 55. პროგრამა ChemSketch-ის დამატებითი ლილაკები, რომელიც ჩნდება პროგრამის Index Name-ის გაშვების შემდეგ

რომელიც მოცემულია ნახ. 56-ზე. სტრუქტურის ქვეშ მოთავსებულ სპეციალურ ფანჯარაში მოცემული იქნება დასახელება. კურსორის მიახლოებისას დასახელების ცალკეულ ფრაგმენტთან (ჩამნაცვლებელი, ძირითადი ჩოჩნხი) ნაერთის სტრუქტურაზე წითელი ფერით მოინიშნება მისი შესაბამისი სტრუქტურული ფრაგმენტი. ეკრანის მარჯვნივ მოთავსებულია ფანჯარა, რომელიც ჩამოთვლილია IUPAC-ის ის პრინციპები, რომლის შესაბამისადაც არის დასახელებული კონკრეტული ნაერთი. ნომენკლატურის გამოყენებული მუხლების შესაბამისი ნომრები ლურჯი ფერით არის აღნიშნული, რაც მიუთითებს, რომ ნებისმიერ მათგანზე დაწკაპუნება ეკრანზე გამოიტანს IUOAC- ის ნომენკლატურის შესაბამის მუხლს სრულად.

სტრუქტურაზე ნუმერაციის დასატანად უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Show Atoms Numbering** (ატომთა ნუმერაციის ჩვენება) მენიუდან **Options** (არჩევანი).



ნახ. 56. პროგრამის Index Name-ის ინტერფეისი

### 6.5.2. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ChemDraw საშუალებით

პროგრამა ChemDraw ასევე იძლევა საშუალებას დასახელებული იქნას ნაერთი. დასახელების შესამუშავებლად აუცილებელია ნაერთის სტრუქტურის აგება (იხ. § 3.1., გვ. 30) და შემდეგ მისი მონიშვნა. მონიშვნის შემდეგ უნდა გავააქტიუროთ ბრძანება **Convert Structure to Name** (სტრუქტურის გარდაქმნა სახელში) მენიუდან **Structure** (სტრუქტურა).

### 6.5.3. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ISIS Draw საშუალებით

ავაგოთ სტრუქტურა პროგრამის ISIS Draw საშუალებით (იხ. § 3.3., გვ. 42). გავააქტიუროთ ბრძანება **AutoNom Standard Name** (სახელის სტანდარტული ავტონომუნკლასტურა) მენიუს **Chemistry** (ქიმია) ქვემენიუდან **Generate Name** (სახელის გენერირება).

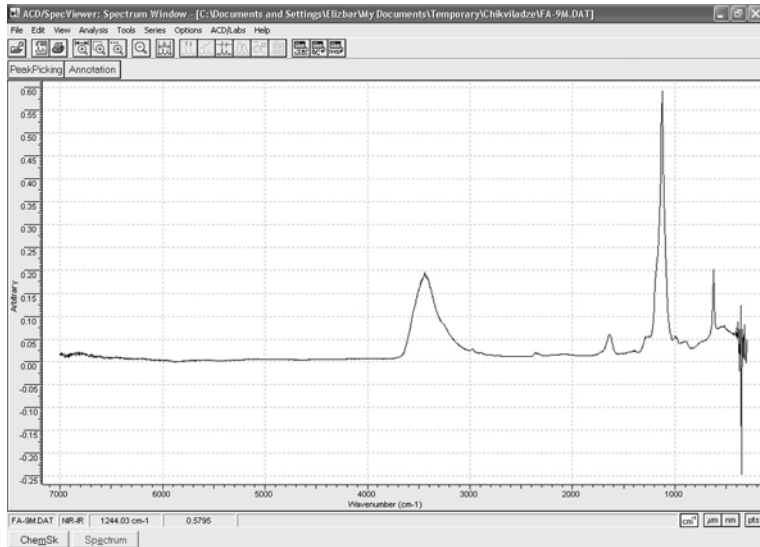
პროგრამის ISIS Draw საშუალებით შესაძლებელია დასახელებული იქნას ნაერთები რომელთა ციკლების რაოდენობა 3-ს არ აღემატება.

### 6.6. სპექტრების დამუშავება

თანამედროვე სპექტრომეტრული აპარატები აღჭურვილნი არიან გაზომვის შედეგად მიღებული სიგნალის ციფრულ სახეში გარდაქმნის საშუალებით. ანუ სპექტრომეტრზე ნაერთის გადაღებისას შესაძლებელია გაზომვის შედეგები ჩაიწეროს ცხრილის ფორმით, რომლის შესაბამისად აგებული გრაფიკს ექნება სპექტრის სახე. აღნიშნული ფაილები, როგორც წესი, წარმოადგენენ ASCII ფაილებს.

ელექტრონული, უი-, იწ, მას და ბმრ-სპექტრების აგებისა და დამუშავებისათვის გამოიყენება ACD Labs პაკეტში შემავალი პროგრამა SpecViewer. მას სპექტრის აგებასთან ერთად საშუალება აქვს განახორციელოს გარკვეული მანიპულაციები: პიკების ინტენსიურობის დადგენა, პიკის შესაბამისი ტალღის სიგრძის განსაზღვრა, პიკებს შორის მანძილის (წანაცვლების) განსაზღვრა, პიკის ფართობის გამოთვლა და სხვა.

პროგრამის SpecViewer ინტერფეისი წარმოდგენილია ნახ. 57-ზე.



ნახ. 57. პროგრამის SpecViewer ინტერფეისი

### 6.6.1. ულტრაიისფერი და ელექტრონული (ხილული) სპექტრების აგება და დამუშავება

თანამედროვე უი- და ხილული ელექტრონული სპექტრომეტრები ალჭურვილნი არიან ინფორმაციის ციფრული სიგნალის გამოსავლის მოწყობილობით, მაგრამ ჯერ-ჯერობით კვლავ აქტიურად გამოიყენება შედარებით ძველი თაობის სპექტრომეტრები, რომლებიც სპექტრს ჩაწერენ საკუთარი თვითჩამწერი მოწყობილობით, ან უარეს შემთხვევაში ოპერატორს თავად უხდება ხელით ტალღის სიგრძისა და შთანთქმის ინტენსიურობის ჩაწერა და მიღებული პარამეტრების მიხედვით სპექტრის აგება. პროგრამა SpecViewer სამივე შემთხვევაში დიდ დახმარებას უწევს ქიმიკოსს. მისი როლი განსაკუთრებით მნიშვნელოვნად ჩანს ბოლო ორ შემთხვევაში, რომლის დროსაც საჭირო არ არის სპექტრის ხელით აგება. აქვე უნდა შევნიშნოთ, რომ SpecViewer-ში სპექტრის სრულყოფილი სახით წარმოჩენისათვის საჭიროა წერტილების

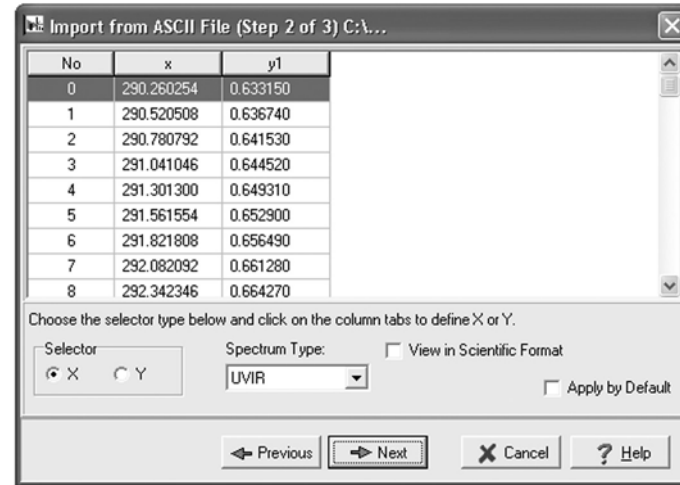
(გაზომვების) დიდი რაოდენობა (დაახლოებით 1000 ჩანაწერი), რაც სპექტრის ხელით ჩაწერისას პრაქტიკულად შეუძლებელია. ასეთ შემთხვევაში სასარგებლოა თუ ჩაწერილ სპექტრს, რომელშიც, როგორც წესი, რამოდენიმე ათეულს არ აღემატება, ჯერ დავამუშავებთ რომელიმე მათემატიკური პროგრამის (მაგალითად Origin) საშუალებით და ინტერპოლაციის საშუალებით გავზრდით წერტილების რაოდენობას.

მიღებული ცხრილური მონაცემებიდან სპექტრის აგებისათვის გავააქტიუროთ ბრძანება **Open** (გახსნა) ან **Import** (იმპორტი) მენიუდან **File** (ფაილი). გაიხსნება ფაილის გახსნის სტანდარტული დიალოგის ფანჯარა. ფაილის ტიპებში შევარჩიოთ **Auto detect** (ავტომატური არჩევა). ფაილის არჩევის შემდეგ გავააქტიუროთ ლილაკი **Ok**. ეკრანზე ჩაიტვირთება ASCII ფაილის კონვერტაციის დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 58).

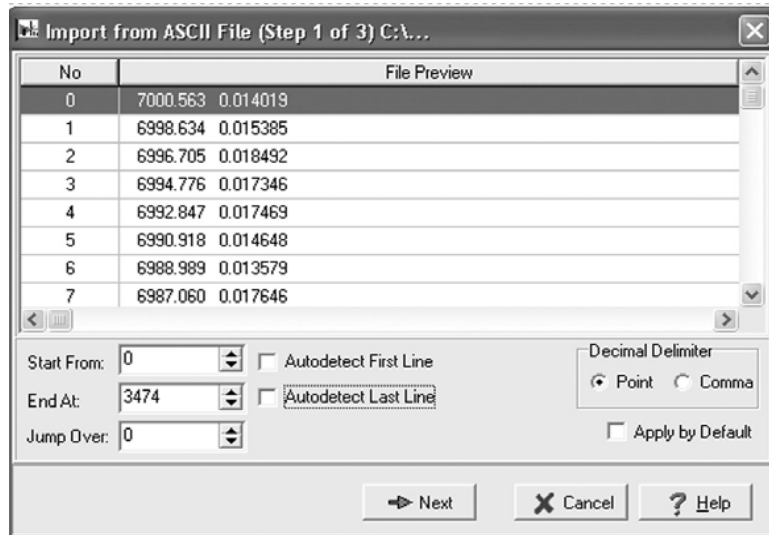
ცხრილის შემოტანისას პროგრამა გვამძღვეს საშუალებას წინასწარ იქნას მნიშვნელობები გადახედული და სურვილის მიხედვით ვცვალოთ პირველი და ბოლო წერტილის მნიშვნელობა. ამასთანავე შეიძლება წერტილებს შორის ბიჯის ვარირება.

- **Start From** (დასაწყისი) - პირველი წერტილების წყვილის რიგობრივი ნომერი, რომლიდანაც იწყება გრაფიკის აგება
- **End At** (დასრულება) - ბოლო წერტილების წყვილის რიგობრივი ნომერი, რომელზეც მთავრდება გრაფიკის აგება
- **Autodetect First Line** (პირველი ხაზის ავტომატური შერჩევა) - ავტომატურად წარმოებს გრაფიკის დასაწყისის შერჩევა. მისი გააქტიურების შემთხვევაში ფუნქცია **Start From** (დასაწყისი) პასიურდება.
- **Jump Over** („გადახტომა“-ბიჯი) - გრაფიკის აგებისას ცხრილის მონაცემებიდან გამოტოვებული იქნება ბიჯის შესაბამისი წერტილების რაოდენობა.
- **Autodetect Last Line** (უკანასკნელი ხაზის ავტომატური შერჩევა) - ავტომატურად წარმოებს გრაფიკის დასასრულის შერჩევა. მისი გააქტიურების შემთხვევაში ფუნქცია **End At** (დასასრული) პასიურდება.

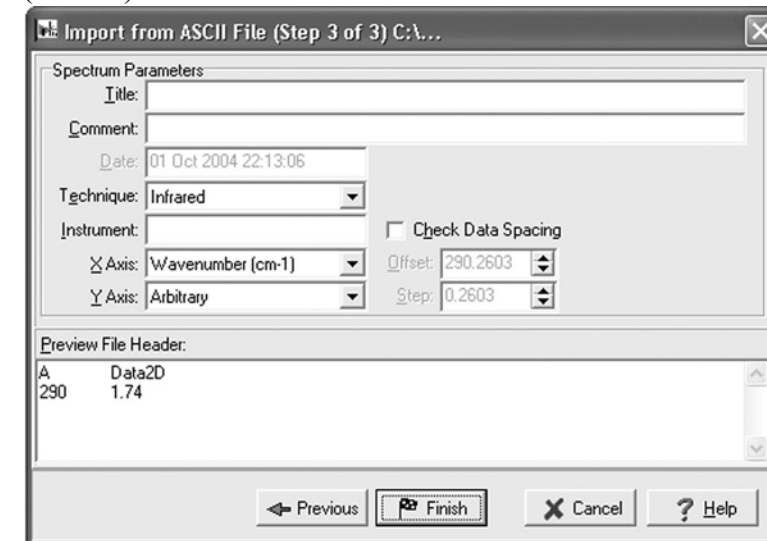
- Decimal Delimiter** (მეათედი ნაწილის ნიშანი) - ოპერაციული სისტემაში შერჩეული რეგიონალური პარამეტრების მიხედვით მეათედის ნიშანი შეიძლება იყოს წერტილი (Point) ან მძიმე (Comma). მოყვანილი პარამეტრების შერჩევის შემდეგ გავააქტიუროთ ღილაკი **Next** (შემდეგი). ჩაიტვირთება ახალი დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 59), რომელშიც უნდა შევარჩიოთ სპექტრის ტიპი.



ნახ. 59. სპექტრის ტიპის შერჩევის დიალოგის ფანჯარა



ნახ. 58. ASCII ფაილის იმპორტირების დიალოგის ფანჯარა

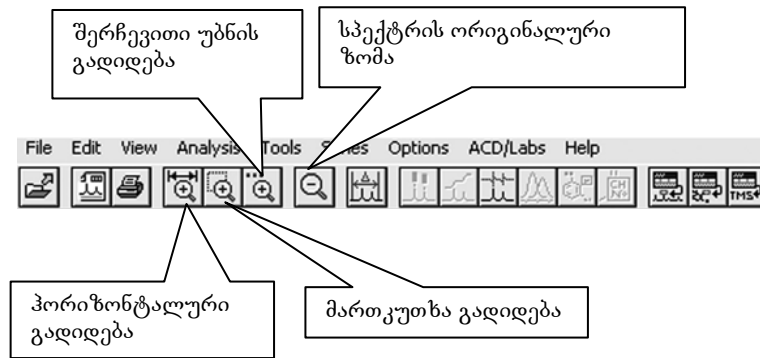


ნახ. 60. იმპორტირების დასასრულის დიალოგის ფანჯარა



მისი საშუალებით ჩამოსაშლელ ნუსხაში **Technique** (*ტექნიკა*) მივუთითოთ ასაგები სპექტრის სახე - **UV-Visible** (*უი-ვიზიბლი ანუ ელექტრონული*). ასევე X-ს კოორდინატთა ღერძის განზომილებად (**X-axis**) ჩამოსაშლელი ნუსხიდან ტალღის სიგრძის განზომილებად შევარჩიოთ ნანომეტრები (**Wavelength (nanometers)**), ხოლო Y-კოორდინატთა ღერძისათვის (**Y-axis**) - შთანთქმა (**Absorbance**). საბოლოოდ გავააქტიუროთ ღილაკი **Finish** (*დასასრული*). დაიხურება დიალოგის ფანჯარა და აიგება სასურველი სპექტრი.

სპექტრის აგების შემდეგ მომხმარებელს აქვს მისი მასშტაბირების საშუალება, ანუ სურვილის მიხედვით შესაძლებელია მთლიანი სპექტრის ან მისი ცალკეული ფრაგმენტის გადიდება. სპექტრის მასშტაბირებას ემსახურება პიქტოგრამული მენიუ.



**ნახ. 61.** პროგრამა SpecViewer-ის პიქტოგრამული მენიუ (აღნიშნულია მასშტაბირების ღილაკები)

პორიზონტალური მასშტაბირების ღილაკის გააქტიურებისას სპექტრის ფანჯარა იყოფა ორ ნაწილად. ზედა ვიწრო ფანჯარაში განთავსდება მთლიანი სპექტრი შემცირებული მასშტაბით, ხოლო ქვედა ფანჯარაში პირიქით - გადიდებული მასშტაბით. მთლიანი სპექტრის დათვალიერება წარმოებს ზედა ფანჯარაში ჩარჩოს გადაადგილებით. სპექტრის გარკვეული უბნის უფრო დიდი მასშტაბირება შესაძლებელია მართკუთხა მასშტაბირების ღილაკის გააქტიურებით (ნახ. 61).

უკანასკნელ შემთხვევაში სპექტრის დათვალიერება ანალოგიური მეთოდით წარმოებს, მაგრამ წინა შემთხვევისაგან განსხვავებით ამ დროს შესაძლებელია მცოცი ჩარჩოს როგორც პორიზონტალური, ისე ვერტიკალური გადაადგილება.

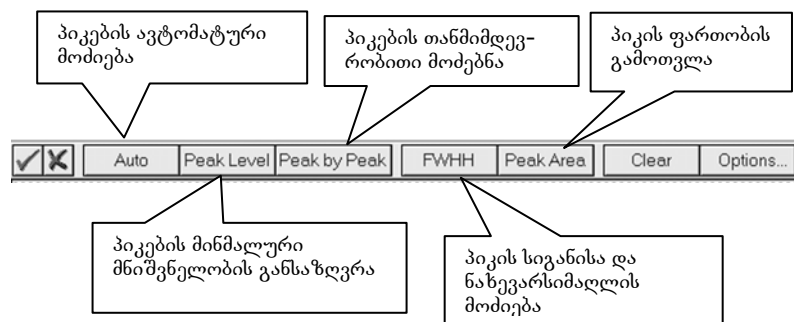
შერჩევითი უბნის გადიდების ღილაკის (ნახ. 61) გააქტიურების შემთხვევაში ეკრანზე გამოვა დამატებითი დიალოგის ფანჯარა, რომელშიც უნდა იქნას მითითებული სპექტრის ის დიაპაზონი, რომლის გადიდებაც არის საჭირო.

მასშტაბირების პროცესის დასრულებისათვის გავააქტიუროთ ორიგინალური ზომის ღილაკი (ნახ. 61).

შთანქმის მაქსიმუმების სპექტრზე დატანისათვის გავააქტიუროთ ღილაკი **PickPicking**, რომელიც მოთავსებულია პიქტოგრამული მენიუს ქვეშ. მისი გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე ჩაიტვირთება ახალი ღილაკები (ნახ. 62). გავააქტიუროთ ღილაკი **Auto** (*ავტომატური*). სპექტრზე პიკების თავზე გაჩნდება შთანქმის ზოლის შესაბამისი ტალღის სიგრძის სიდეები. თუ სტექტრი მოიცავს სხვადასხვა ინტენსიურობების შთანქმის მრავალრიცხოვან სერიას, ღილაკის **Peak Level** (*პიკის სიმაღლე*) შესაძლებელია გარკვეული (სუსტი) ინტენსიურობის პიკების გამორიცხვა. ამისათვის გავააქტიუროთ ღილაკი **Peak Level** (*პიკის სიმაღლე*).

ეკრანზე გამოჩნდება წითელი ფერის პორიზონტალური ხაზი, რომლის გადაადგილება წარმოებს თავუნას საშუალებით. თავუნას მარცხენა ღილაკის დაწკაპუნებით იგი დაფიქსირდება და პროგრამა იგნორირებას გაუკეთებს ყველა იმ პიკს, რომლის ინტენსიურობაც ნაკლები იქნება პორიზონტალური წითელი ხაზის სიდიდეზე. შთანქმის სიდიდეების დაწერა შესაძლებელია არაავტომატურ რეჟიმშიც. უკანასკნელ შემთხვევაში უნდა გააქტიურდეს ღილაკი **Peak by Peak** (*პიკიდან პიკამდე*). მისი გააქტიურების შემდეგ თავუნას კურსორი მივუახლოვოთ შთანქმის მაქსიმუმს. პიკის სიახლოვეში მოხვედრის შემთხვევაში გამოჩნდება ვერტიკალური წითელი ხაზი და წითელ ჩარჩოში მოთავსებული შთანქმის მაქსიმუმის შესაბამისი რიცხვითი მნიშვნელობა. დაწკაპუნების შემთხვევაში მოცემული რიცხვი დაფიქსირდება ეკრანზე. აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ აგრეთვე შესაძლებელია სპექტრის ნებისმიერი მნიშვნელობის აღნიშვნა, თუ თავუნასთან ერთად გამოვიყენებთ Shift ღილაკს.

პროგრამა SpecViewer-ის საშუალებით მარტივად შესაძლებელია გამოთვლილ იქნას პიკის სიგანე, ნახევარსიმაღლე და ფართობი, რისთვისაც გამოიყენება ღილაკები **FWHH** (Full Width and Half Height-სრული სიგანე და ნახევარსიმაღლე) და **Peak Area** (პიკის ფართობი). პირველი



ნახ. 62 პიკების დამუშავების ღილაკები პროგრამა SpecViewer-ში

ღილაკის გააქტიურების შემთხვევაში შთანთქმის მაქსიმუმზე წითელი ხაზებით აღინიშნება მისი შესაბამისი სრული სიგანე და ნახევარსიმაღლე. შთანთქმის მაქსიმუმის ფართობის გამოთვლისათვის გავაქტიუროთ ღილაკი **Peak Area** (პიკის ფართობი), მივიყვანოთ კურსორი პიკის დასაწყისთან და დავაწკაპუნოთ. გაივლება ვერტიკალური წითელი ხაზი. გავაგრძელოთ კურსორის გადაადგილება პიკის დასასრულისაკენ და ხელახლა დავაწკაპუნოთ. გამოითვლება პიკის ფართობი, რომლის რიცხვითი მნიშვნელობა და გრაფიკული გამოსახულება წითელი ფერის ხაზით განთავსდება პიკის ფუძის ქვეშ.

SpecViewer-ში აგებული და დამუშავებული სპექტრი შესაძლებელია დაბეჭდილი იქნას უშუალოდ პროგრამა SpecViewer-დან. ასევე შესაძლებელია მისი ექსპორტირება პროგრამაში ChemSketch დამატებითი დამუშავებისათვის (მაგალითად, საკვლევი ნაერთის სტრუქტურული ფორმულის დაწერისათვის).

### 6.6.2. ინფრაწითელი სპექტრების აგება და დამუშავება

ინფრაწითელი სპექტრების აგება ელექტრონული სპექტრების აგების ანალოგიურია (იხ. § 6.6.1.). მონაცემების იმპორტირებისას მითითებული უნდა იქნას სპექტრის ჩაწერის შესაბამისი ტექნიკა და ტალღის სიგრძის განზომილება. ამისათვის დიალოგის ფანჯარაში (ნახ. 60) ჩამოსაშლელ ნუსხაში **Technique** (ტექნიკა) მიუთითოთ სპექტრის სახე **Infrared** (ინფრაწითელი). X-ღერძზე განზომილებად შევირჩიოთ ტალღური რიცხვი - **Wavenumber (cm-1)**.

### 6.6.3. მას-სპექტრების აგება და დამუშავება

მას-სპექტრის აგებისათვის დიალოგის ფანჯარაში (ნახ. 59) სპექტრის ტიპად (Spectrum Type) უნდა შევირჩიოთ **MASS**. მასშტაბირების მანიპულაციები სპექტრზე ანალოგიურია ელექტრონული სპექტრებისა (იხ. § 6.6.1.).

### 6.6.4. <sup>1</sup>H-ბმრ სპექტრების აგება და დამუშავება

მას-სპექტრის აგებისათვის დიალოგის ფანჯარაში (ნახ. 59) სპექტრის ტიპად (Spectrum Type) უნდა შევირჩიოთ **1D NMR**. მასშტაბირების მანიპულაციები სპექტრზე ანალოგიურია ელექტრონული სპექტრებისა (იხ. § 6.6.1.). ასევე შესაძლებელია სიგნალებს შორის წანაცვლების გამოანგარიშება.

## 6.7. მარტივი ქიმიური გაანგარიშებების პროგრამირება

ზშირად რაიმე ქიმიური მარტივი გათვლების შესრულებისათვის მზა პროგრამების გამოყენებასთან შედარებით უფრო ხელსაყრელია „საკუთარი“ პროგრამის შედგენა. გასანგარიშებელი პროცესის მათემატიკური მოდელის არსებობის შემთხვევაში, გაანგარიშების დაპროგრამება შეიძლება მარტივად განხორციელდეს ისეთი პროგრამების საშუალებით, როგორცაა MS Excell, Visual Basic და სხვა.

პროგრამა MS Excell შედის საყოველთაოდ ცნობილ პროგრამულ პაკეტში MS Office და პრაქტიკულად ყველა პერსონალურ კომპიუტერზე არის ინსტალირებული. მისი გამოყენების შემთხვევაში შესაძლებელია შედგეს ელექტრონული ცხრილი, რომლის გარკვეულ უჯრებში მოხდება გაანგარიშებების შესრულება.

მეორე გზა მარტივი გაანგარიშებების შესრულებისათვის არის ავტონომიური პროგრამის შედგენა, რომელსაც დამოუკიდებლად მუშაობის უნარი ექნება. ასეთი ტიპის პროგრამების შექმნა ხდება პროგრამირების რომელიმე ენის გამოყენებით, რომელთაგან ყველაზე მარტივი და პრაქტიკული არის Visual Basic.

ვინაიდან Visual Basic-ში პროგრამის შედგენა მოითხოვს საკუთრივ პროგრამირების ენის ცოდნას, ამიტომ განვიხილოთ პროგრამული კოდის შედგენა MS Excell-ის საშუალებით.

ვთქვათ, რაიმე რეაქციისათვის გვინდა გავიანგარიშოთ არენიუსის კოეფიციენტები და აქტივაციის ენერჯია. ჩავატაროთ რამოდენიმე (მაგალითად ხუთი, როგორც წარმოგენილ მაგალითშია განხილული) პარალელური ცდა სხვადასხვა ტემპერატურაზე (ტემპერატურა გამოსახული უნდა იყოს K-ში) და ავიღოთ მონაცემები - გავითვალთ რეაქციის სიჩქარის მუდმივას ექსპერიმენტული მნიშვნელობები.

ახლა შევუდგეთ უშუალოდ ელექტრონული ცხრილის შედგენას.

MS Excell-ის ცხრილის C9 უჯრაში ჩავწეროთ ცდების რაოდენობა-5. B11-B15 უჯრებში შევიტანოთ ჩატარებული

რეაქციების ტემპერატურები კელვინებში, ხოლო C11-C15 უჯრებში კი მათი შესაბამისი რეაქციის სიჩქარის მუდმივას ექსპერიმენტული მნიშვნელობები.

გაანგარიშების პირველ საფუძვურზე გათვლილი უნდა იქნას ტემპერატურის შებრუნებული სიდიდეები. ამისათვის D11 უჯრაში უნდა ჩაიწეროს შესაბამისი ფორმულა. კერძოდ, აქტიური გავხადოთ D11 უჯრა და შევიტანოთ რიცხვითი მნიშვნელობის ნაცვლად ფორმულა. ფორმულის ჩაწერისათვის თანმიმდევრულად შევიტანოთ შემდეგი სიმბოლოები: „=1/B11“. D11 უჯრაში ფორმულის შეტანის შემდეგ მოვახდინოთ მისი კოპირება D12-D15 უჯრებში. აღიშნულ უჯრებში ფორმულების ჩაწერისთანავე გამოჩნდება მათი რიცხვითი მნიშვნელობები.

შემდენ ეტაპზე ვინგარიშოთ  $1/t^2$  მნიშვნელობა. მისი ანგარიშისათვის E11 უჯრაში ჩავწეროთ ანალოგიური მეთოდით ფორმულა „=1/D11\*D11“ და კვლავ მოვახდინოთ მისი კოპირება E12-E15 უჯრებში.

ახლა ვიანგარიშოთ ტემპერატურის ლოგარითმები. F11 უჯრაში შევიტანოთ ფორმულა „=LN(C11)“ და მისი კოპიები გადავიტანოთ F12-F15 უჯრებში.

შემდეგ ეტაპზე G11 უჯრაში შევიტანოთ ფორმულა „=D11\*F11“ და კვლავ მოვახდინოთ მისი კოპირება G12-G15 უჯრებში.

ახლა მოვახდინოთ ნაანგარიშები სიდიდეების ჯამის დადგენა. ამისათვის, D16 უჯრაში ჩავწეროთ ფორმულა „=SUM(D11:D15)“. ანალოგიურად მოვიქცეთ E16, F16, G16 უჯრებისათვის.

C19 უჯრაში შევიტანოთ ფორმულა „=(G16\*D16-F16\*E16)/(D16^2-C9\*E16)“, C20 უჯრაში „=- (G16-C19\*D16)/E16“, C21 უჯრაში - „=8.314\*C20“, ხოლო C22 უჯრაში კი - „=EXP(C19)“.

აღნიშნული გაანგარიშებების შესრულების შემდეგ მოსამზადებელი ეტაპი არის დასრულებული. ახლა, უშუალოდ მიზნობრივი სიდიდეების ანგარიში განვახორციელოთ. H11 უჯრაში შევიტანოთ ფორმულა „=C22\*EXP(-C20/B11)“ და

მოვანდინოთ მისი კოპირება H12-H15 უჯრებში. H16 ურაში კი ვინგარიშოთ H11-H15 სიდიდეების ჯამი, რისთვისაც შევიტანოთ ფორმულა „=SUM(H11:H15)“

არენიუსის განტოლების საბოლოო სახეა:  

$$K = C22 * e^{C20/T}$$

მიღებულ ელექტრონულ ცხრილს ექნება შემდეგი სახე (ნახ. 69).

| კონვერტირება  |                     |                                    |                      |                     |          |          |
|---|---------------------|------------------------------------|----------------------|---------------------|----------|----------|
| აქტივაციის ენერჯისა და არენიუსის კონვერტირების გამოთვლა   |                     |                                    |                      |                     |          |          |
| შეიტანეთ უჯრებში C9 ცდების რაოდენობა, ხოლო უჯრებში B11 და C11-დან ტემპერატურა (T,K) და სიჩქარის მუდმივა (Kგეჰპ) |                     |                                    |                      |                     |          |          |
| N= 5  |                     |                                    |                      |                     |          |          |
| T <sup>0</sup> ,K   | Kგეჰპ               | 1/T,K                              | (1/T,K) <sup>2</sup> | LOG(K)              | LOG(K)*T | Kგამოთ.  |
| 440   | 0.1034              | 0.002273                           | 5.17E-06             | -2.269150317        | -0.00516 | 0.103418 |
| 460   | 0.155               | 0.002174                           | 4.73E-06             | -1.864330162        | -0.00405 | 0.154974 |
| 480   | 0.2245              | 0.002083                           | 4.34E-06             | -1.493879572        | -0.00311 | 0.224533 |
| 520   | 0.433               | 0.001923                           | 3.7E-06              | -0.837017551        | -0.00161 | 0.43268  |
| 540   | 0.5788              | 0.001852                           | 3.43E-06             | -0.546798284        | -0.00101 | 0.57914  |
|   |                     | 0.010305                           | 2.14E-05             | -7.011175886        | -0.01494 | -0.01494 |
|   |                     | D                                  | F                    | E1                  | H        |          |
| M=  | 7.033953989         |                                    |                      |                     |          |          |
| P=  | 4093.289203         |                                    |                      |                     |          |          |
| E=  | 34031.60643         | კვლევითი/მოლო - აქტივაციის ენერჯია |                      |                     |          |          |
| K <sub>0</sub> =  | 1134.507584         | წინაექსპონენციალური მამრავლი       |                      |                     |          |          |
|   | არენიუსის განტოლება | Kგამოთ.=                           | 1134.507584          | *EXP(- 4093.289 /T) |          |          |

ნახ. 63. არენიუსის კონვერტირებისა და აქტივაციის ენერჯის გამოთვლის ელექტრონული ცხრილი პროგრამაში MS Excell.

## 7. გამოთვლითი ქიმიის საფუძვლები

გამოთვლითი ქიმია არღვევს მეცნიერების ტრადიციულ საზღვრებს და ისეთ დისციპლინებს შორის ავსებს სივრცეს, როგორებიცაა ერთის მხრივ ქიმია, ხოლო მეორეს მხრივ ბიოლოგია, ფიზიკა, მათემატიკა, კომპიუტერული მეცნიერებები. ქიმიის ეს დისციპლინა ჩამოყალიბებულია რამოდენიმე ათეული წლის წინ ხოლო გამოთვლითი ქიმიის ჟურნალის Journal of Computational Chemistry გამოცემის შემდეგ კი მისი განვითარების სიჩქარე ერთი-ორად გაიზარდა.

გამოთვლითი ქიმიის დანიშნულება კომპიუტერის საშუალებით მოლეკულებზე ექსპერიმენტის და სხვა ოპერაციების ჩატარებაა. ეს უკანასკნელი ზოგიერთ შემთხვევაში ხასიათდება მთელი რიგი უპირატესობებით ტრადიციულ ქიმიურ (ლაბორატორიულ) ექსპერიმენტთან შედარებით:

- ექსპერიმენტი სრულდება გაცილებით სწრაფად;
- არ საჭიროებს ძვირადღირებული რეაგენტების გამოყენებას;
- შესაძლებელია ჰიპოთეზური რეაგენტების გამოყენება;
- ექსპერიმენტის ჩატარება პარამეტრების ვარიაციის საკმაოდ დიდი დიაპაზონით.

გამოთვლითი ქიმიის ძირითადი ასპექტებია:

- მოლეკულური მოდელირება;
- გამოთვლითი მეთოდები;
- კომპიუტერის საშუალებით მოლეკულების დიზაინი;
- ქიმიურ მონაცემთა ბაზები;
- ორგანული სინთეზის დაგეგმვა-შემუშავება.

მოლეკულური მოდელირება ითვალისწინებს ორგანო-ზომილებიანი და სამგანზომილებიანი სტრუქტურების შექმნისა და თვისებების დადგენას.

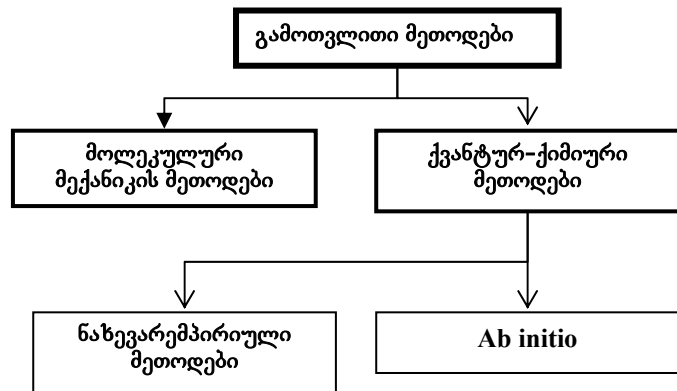
გამოთვლითი მეთოდები, თავის მხრივ, ანგარიშობს სტრუქტურებსა და მათ თვისებებს, ადგენს მონაცემების ბაზას, რომლებიც საჭიროა მოდელის შექმნისათვის.

### 7.1. გამოთვლითი მეთოდების საფუძვლები

გამოთვლითი ქიმია აერთიანებს სხვადასხვა მათემატიკურ მეთოდს, რომლებიც შეიძლება დაიყოს ორ დიდ ჯგუფად, მოლეკულური მექანიკა და ქვანტური მექანიკა.

მოლეკულური მექანიკა ეფუძვნება კლასიკური ფიზიკის კანონებს და მოლეკულის ბირთვებს განიხილავს ელექტრონების გარეშე.

ქვანტური მექანიკა კი დაფუძნებულია შრედინგერის განტოლებაზე და მოლეკულას აღწერს ელექტრონული ღრუბლების საშუალებით. ქვანტური მექანიკა თავის მხრივ შეიძლება დაიყოს ორ ჯგუფად: *ab initio* და ნახევარემპირიულ მეთოდებად (ნახ. 64).



ნახ. 64. გამოთვლითი ქიმიის მეთოდები

### 7.2. გამოთვლითი მეთოდების საშუალებები

გამოთვლითი მეთოდების საშუალებით წარმოებს მოლეკულის ზედაპირული პოტენციური ენერჯის ანგარიში (ზპე). ეს უკანასკნელი შესაძლებელია განხილულ იქნას როგორც მოლეკულაში შემავალი ატომების ურთიერთგავლენის ძალეების ჯამი. ამიტომ ზპე-ს მნიშვნელობა შესაძლებელია დაკავშირებული იქნას მოლეკულის ქიმიურ და სტრუქტურულ თვისებებთან. გამოთვლითი მეთოდები ანგარიშისას იყენებენ სხვადასხვა მიახლოებას ანუ მათი ანგარიშის შესრულების „გზა“ განსხვავებულია, მაგრამ შესაძლებელია გამოიყოს შემდეგი სახის საერთო ბაზური გაანგარიშებები:

- წერტილოვანი ენერჯის ანგარიში - ამ დროს ხორციელდება ზპე-ს ანგარიში მოცემული ატომების კოორდინატების მწკრივისათვის;
- გეომეტრიული ოპტიმიზაცია - მოდელში ატომების იმგვარი მოდიფიცირება, როდესაც ატომების ურთიერთგავლენა დაიყვანება მინიმუმამდე და შესაბამისად მოლეკულის სრული ენერჯია მინიმუმს უტოლდება
- თვისებების ანგარიში - ზოგიერთი ფიზიკური და ქიმიური თვისებების (მუხტის სიდიდე, დიპოლური მომენტი, წარმოქმნის სითბო) გაანგარიშება.

გარდა ამისა, აღნიშნული მეთოდები შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას სპეციალიზირებული კვლევისათვისაც, როგორცაა მაგალითად მოლეკულის კონფორმაციული სტრუქტურების მოძიება და მოლეკულური დინამიკა.

### 7.3. საუკეთესო მეთოდის შერჩევა

მიუხედავად იმისა, რომ შექმნილია არც თუ ცოტა გამოთვლითი მეთოდი, დღეისათვის მაინც არ არსებობს უნივერსალური მეთოდი, რომლის გათვლებიც დააკმაყოფილებდა ნებისმიერ მოთხოვნას. ეს ძირითადად განპირობებულია გათვლების დიდი სირთულით, რაც იძულებულს გვხდის ამა თუ იმ გაანგარიშებისას გამოვიყენოთ სხვადასხვა მიახლოებები. მეთოდის შერჩევას უდიდესი მნიშვნელობა აქვს, რათა თავიდან იქნას აცილებული გაანგარიშებების მნიშვნელოვანი გადახ-

რები თუ უხეში შეცდომები. მეთოდის შერჩევას გათვალისწინებული უნდა იქნას ისეთი ფაქტორები, როგორებიცაა გასაანგარიშებელი მოლეკულის ბუნება, გაანგარიშების მიზანი და დანიშნულება. ზოგიერთი გამოთვლითი მეთოდი იყენებს გარკვეულ ექსპერიმენტულ მონაცემებს. ამიტომ ამ უკანასკნელ შემთხვევაში უდიდესი მნიშვნელობა აქვს ექსპერიმენტული მონაცემების სიზუსტესა და რაოდენობას. გაანგარიშებების ჩატარებისას ასევე გათვალისწინებული უნდა იქნას აპარატურის სიმძლავრე (კომპიუტერის მოდიფიკაცია) და გაანგარიშების დრო. ზემოჩამოთვლილი მეთოდებიდან შეიძლება გამოიყოს შემდეგი სამი ძირითადი კრიტერიუმი:

- **მოდელის ზომა** - მოდელის ზომა შეიძლება ჩაითვალოს სერიოზულ მალიმიტირებულ ფაქტორად მეთოდის შერჩევას (იხ. ცხრილი 1).

**ცხრილი 1. მოლეკულაში ატომების მაქსიმალური რაოდენობა გამოთვლითი მეთოდის შერჩევას**

| მეთოდი              | ატომების მაქსიმალური რაოდენობა |
|---------------------|--------------------------------|
| <i>ab initio</i>    | 10                             |
| ნახევარემპირიული    | 100                            |
| მოლეკულური მექანიკა | 1000                           |

პროგრამა CS Mopac-ში, რომელსაც იყენებს პროგრამული პაკეტი CS Chem Office, ატომების რაოდენობა არ უნდა აღემატებოდეს 300 ატომს, ხოლო „მძიმე“ ატომის რაოდენობა არ უნდა იყოს 120-ზე მეტი.

- **პარამეტრების არსებობა** – ზოგიერთი მეთოდის საშუალებით გაანგარიშება დაფუძნებულია ექსპერიმენტულ მონაცემებზე. მათი არასაკმარისობის შემთხვევაში გაანგარიშება შესაძლებელია ჩატარებულ იქნას დიდი ცდომილებებით.
- **აპარატურული საშუალებები** - გაანგარიშების მეთოდის შერჩევას დიდ როლს თამაშობს კომპიუტერის სწრაფმოქმედება, ვინაიდან სხვადასხვა მეთოდს განსხვავებული დრო ესაჭიროება ანგარიშისათვის. ამას-

თანავე, ანგარიშის დრო დამოკიდებულია მოდეელში შემავალი ატომების რაოდენობაზე (იხ. ცხრილი 2).

**ცხრილი 2. გამოთვლების დროის ფარდობითი დამოკიდებულება მეთოდის გვარობასა და ატომების რაოდენობაზე (N-მოდეელში ატომების რაოდენობა)**

| მეთოდი              | ანგარიშის დრო  |
|---------------------|----------------|
| <i>ab initio</i>    | $N^4$          |
| ნახევარემპირიული    | $N^3$ ან $N^2$ |
| მოლეკულური მექანიკა | $N^2$          |

## 7.4. გამოთვლითი მეთოდების მოკლე მიმოხილვა

მოლეკულური მექანიკის გათვლებით შესაძლებელია 1000-მდე ატომის შემცველი მოდელების გაანგარიშება. აღნიშნული მეთოდი კარგ შედეგებს იძლევა ორგანული ნაერთების, ოლიგონუკლეოტიდების, პეპტიდებისა და საქარიდების გაანგარიშებისას. იგი ასევე მისაღებია აირად ფაზაში მყოფი ნაერთებისათვის. მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშების მეთოდებიდან აღსანიშნავია:

- ენერჯის მინიმაზაცია, რომლის საშუალებითაც წარმოებს სტაბილური კონფორმაციული ფორმის დადგენა;
- წერტილოვანი ენერჯის ანგარიში - იგი საშუალებას იძლევა შედარებული იქნას ერთდაიგივე მოლეკულის რამოდენიმე კონფორმაციული ფორმა;
- კონფორმაციული სივრცის მოძებნა - იგი მიიღწევა ერთეულოვანი დიჰედრალური კუთხის ვარირებით;
- მოლეკულის მოძრაობის შესწავლა მოლეკულური დინამიკის გამოყენებით.

ქვანტურ-მექანიკური მეთოდების გამოყენება შედარებით დიდ გაანგარიშებებს მოიცავს. ამიტომ მოდეელში ატომების რაოდენობის ლიმიტი მოლეკულურ მექანიკასთან შედარებით მცირეა და შეადგენს 120 ატომს. ქვანტურ-

მექანიკური გაანგარიშებები წარმატებით შეიძლება გამოყენებული იქნას ორგანული, მეტალოორგანული და მცირე ოლიგომერების (პეპტიდების, ნუკლეოტიდების, საქარიდების) გაანგარიშებისათვის. აირადი ფაზისა და გამხსნელის გარემოცვის გაანგარიშებისათვის და ასევე, ძირითადი, ალგუნებული და გარდამავალი მდგომარეობების გაანგარიშებისათვის.

*ab initio* მეთოდი ემსახურება 10 ატომამდე შემცველობის სისტემებს. აღნიშნული მეთოდით შესაძლებელია გავითვალთ როგორც ორგანული და მეტალოორგანული ნაერთები, ისე მოლეკულური ფრაგმენტები (ენზიმების კატალიზური კომპონენტები). ქვანტურ-მექანიკური გათვლებით შესაძლებელია მიღებული იქნას შემდეგი სახის ინფორმაცია:

- მოლეკულური ორბიტალების ენერგიები და საკუთარი ვექტორების კოეფიციენტები;
- ნაერთის წარმოქმნის სიბოის რაოდენობა;
- მოლეკულური ორბიტალების კოეფიციენტების საშუალებით გამოთვლილი პარციალური ატომური მუხტები;
- ელექტროსტატიკური პოტენციალები;
- დიპოლური მომენტი;
- გარდამავალი მდგომარეობის ენერგია და გეომეტრია;
- ბმის დისოციაციის ენერგიები;

გამოთვლითი ქიმიის მეთოდები შეჯამებული სახით შესაძლებელია წარმოდგინდეს ცხრილის სახით (იხ. დანართი A).

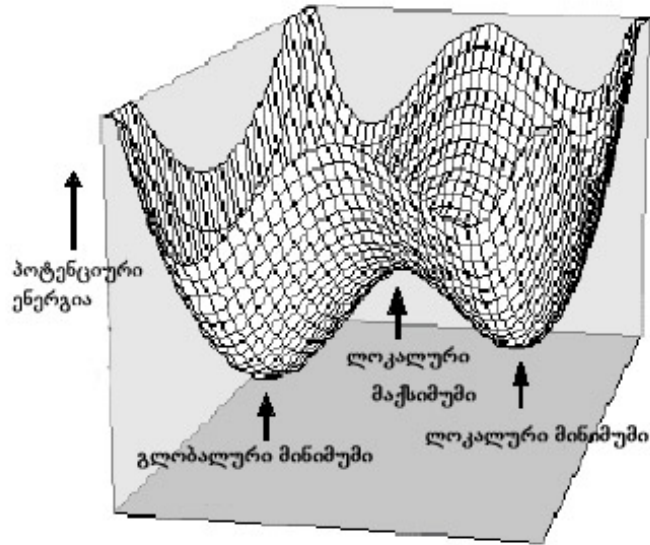
## 7.5. ზედაპირის პოტენციური ენერგია

ზედაპირის პოტენციური ენერგიის საშუალებით შესაძლებელია ახსნილი იქნას ცალკეული მოლეკულა და მოლეკულების ანსამბლი ან ქიმიური რეაქციის სისტემა. იგი ასევე იძლევა წარმოდგენას კონფორმერების (ჩამოფარებული და დამუხრუჭებული) ფარდობით ენერგიებზე. ზედაპირული პოტენციური ენერგიის განხილვისას უნდა გვახსოვდეს, რომ ქვემოთ ჩამოთვლილი შემთხვევებისათვის გამოთვლილი ზედაპირის პოტენციური ენერგია განსხვავდება ერთმანეთისაგან:

- მოლეკულები, რომელნიც შეიცავენ განსხვავებული ბუნების ატომებს (მაგ. ეთანი და ქლორეთანი);
- ერთდაიგივე მოლეკულებისათვის ძირითად და ალგუნებულ მდგომარეობებაში;
- ერთდაიგივე შედგენილობის მოლეკულებისათვის, რომელთაც განსხვავებული აღნაგობა აქვთ (მაგ. ციკლოპროპანი და პროპენი).

მოდელის ზედაპირის პოტენციური ენერგიის გამოსახულებას წარმოადგენს მრავალგანზომილებიანი ზედაპირი, რომლის განზომილებების რიცხვი დამოკიდებულია დამოუკიდებელ ცვლადების რაოდენობაზე. ვინაიდან თითოეულ ატომს გააჩნია სამი დამოუკიდებელი ცვლადი (X,Y,Z კოორდინატები) მრავალატომიანი მოლეკულის ზედაპირის პოტენციური ენერგიის სურათის გამოსახვა ვიზუალურად შეუძლებელია. თუმცა შესაძლებელია ამ პრობლემის განზოგადება, თუ დავაკვირდებით მხოლოდ ორ რომელიმე ცვლადს (მაგ. X და Y კოორდინატს). ამ უკანასკნელ შემთხვევაში მიღებულ სურათს ექნება შემდეგი სახე (ნახ. 65).

ზპე-ს მახასიათებელ წერტილებს წარმოადგენს ექსტრემუმების წერტილები: გლობალური მინიმუმი, ლოკალური მინიმუმი და მაქსიმუმი. სტრუქტურის ყველაზე მდგრადი კონფორმერი შეესაბამება გლობალური მინიმუმის წერტილს. ამი-



ნახ. 65. ზედაპირის პოტენციური ენერჯიის გამოსახვა ორი ცვლადისათვის

ტომ მოლეკულის პპე-ს აქვს მხოლოდ ერთი გლობალური მინიმუმის წერტილი. მისგან განსხვავებით, მოლეკულას შესაძლებელია ჰქონდეს რამოდენიმე ლოკალური მინიმუმის წერტილი, რომელიც შეესაბამება სტაბილურ კონფორმაციულ ფორმებს. ლოკალური მაქსიმუმის წერტილები კი შეესაბამება კონფორმერებს შორის გარდამავალ მდგომარეობებს.

## 7.6. წერტილოვანი ენერჯიის განვარაუება

წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიში შესაძლებელია გამოყენებული იქნას მოცემული გეომეტრიის მქონე მოლეკლის თვისებების ანგარიშისათვის. წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიშისას ყურადღება უნდა მიექცეს, თუ ზედაპირის პოტენციური ენერჯიის რომელ წერტილში იმყოფება მოცემულ მომენტში მოლეკულა:

- გლობალური მინიმუმის წერტილში წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიშში იძლევა ინფორმაციას მოლეკულის ყველაზე მდგრად კონფორმერზე;
- ლოკალური მინიმუმის წერტილში წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიშში იძლევა ინფორმაციას მოლეკულის ერთ-ერთ სტაბილურ კონფორმერზე;
- ლოკალური მაქსიმუმის წერტილში წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიშში იძლევა ინფორმაციას მოლეკულის გარდამავალ მდგომარეობის შესახებ;
- წერტილოვანი ენერჯიის ანგარიში ზპე-ს სხვა წერტილებში იძლევა ინფორმაციას ნაერთის კონკრეტულ გეომეტრიაზე, რომელიც არის შუალედური ფორმა სტაბილურ და გარდამავალ ფორმებს შორის.

რომ წერტილოვანი ენერჯიის სიდიდეები, რომელიც მიღებული იქნება სხვადასხვა მეთოდით გათვლისას, არ შეიძლება ერთმანეთს იქნას შედარებული, ვინაიდან თითოეული მეთოდი იყენებს საკუთარ, ერთმანეთისაგან განსხვავებულ მიახლოებებს!



## 7.7. გეომეტრიის ოპტიმიზაცია

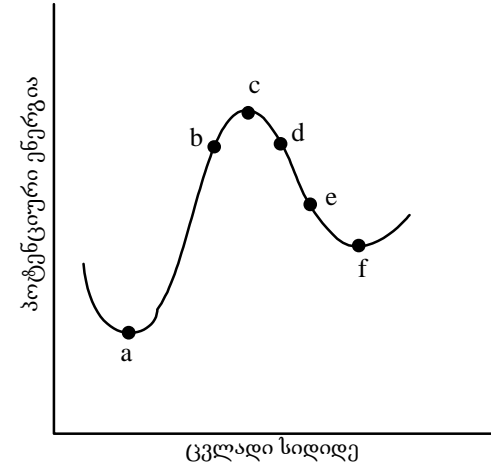
გეომეტრიული ოპტიმიზაცია ემსახურება მდგრადი კონფორმერის მოძებნას. როგორც წესი, გეომეტრიულ ოპტიმიზაციას მიმართავენ ნებისმიერი ქვანტურ-მექანიკური გათვლების წინ. ენერგიის გლობალური და ლოკალური მინიმუმის მოძიება ხშირად შეესაბამება ენერგიის მინიმიზაციას, ხოლო ლოკალური მაქსიმუმის წერტილის მოძიება მიუთითებს გარდამავალი მდგომარეობის ოპტიმიზაციას.

გეომეტრიული ოპტიმიზაციის დრო და შედეგი დამოკიდებულია ისეთ ფაქტორებზე, როგორცაა სტრუქტურის საწყისი გეომეტრია, გეომეტრიული ოპტიმიზაციის მისაღწევად გამოყენებული ფუნქციის სახე და მიახლოების კრიტერიუმი.

გეომეტრიული ოპტიმიზაცია მოიცავს შემდეგი სახის ოპერაციების შესრულებას: პირველ რიგში გამოითვლება წერტილოვანი ენერგია სტრუქტურის საწყისი გეომეტრიისათვის. შემდეგ იცვლება რომელიმე ატომის ან ატომების სივრცული კოორდინატები (ანუ ადგილი აქვს ბმის სიგრძისა და ბმის კუთხის ცვლილებას) და ხელახლა გამოითვლება წერტილოვანი ენერგია. აღნიშნულ წერტილებში ითვლება აგრეთვე ფუნქციის პირველი და მეორე რიგის წარმოებულები, რომლის საშუალებითაც დგინდება როგორც გლობალური და ლოკალური მინიმუმის, ისევე ლოკალური მაქსიმუმის წერტილის ადგილმდებარეობა.

გაანგარიშებებისა და სტრუქტურული ცვლილებების შეტანა დამთავრდება მაშინ, რომდესაც მიღწეული იქნება ენერგიის მინიმუმი.

ზემონათქვამის სადემონსტრაციოდ შეიძლება მოვიყვანოთ შემდეგი თვალსაჩინო მაგალითი. ქვემოთ მოცემულ ნახაზზე (ნახ. 66) სიმარტივისათვის აღებულია ერთი ცვლადის ფუნქცია. მაგალითად, ანგარიში იწყება  $b$  წერტილში ანუ საწყისი სტრუქტურის პოტენციური ენერგია არის  $b$ . მისი ოპტიმიზაცია მიგვიყვანს გლობალური მინიმუმის წერტილში  $a$ . ხოლო თუ ანგარიში დაიწყება  $d$  წერტილიდან, მაშინ ოპტიმიზაცია შეიძლება სტრუქტურას, რომლის ზედაპირის პოტენციური ენერგია იქნება  $f$ . ანუ მივიღებთ არა ყველაზე მდგრად სტრუქტურას, არსმედ ერთ-ერთ სტაბილურ კონფორმერს.



ნახ. 66. პოტენციური ენერგიის წირი ერთი ცვლადისათვის:  
**a**- გლობალური მინიმუმის წერტილი, **c**-ლოკალური მაქსიმუმის წერტილი, **f**-ლოკალური მინიმუმის წერტილი, **b**, **e** და **d** გარდამავალი წერტილები

ენერგიის გრადიენტის მნიშვნელობის შერჩევის მიხედვით შესაძლებელია სტრუქტურის ოპტიმიზაცია, როგორც გლობალურ და ლოკალურ მინიმუმების წერტილებში, ისე ლოკალური მაქსიმუმის წერტილშიც. კერძოდ, თუ ენერგიის სიდიდე ძალიან დიდია, მაშინ გეომეტრიული ოპტიმიზაცია იძლევა თხემის წერტილს, ანუ სტრუქტურას, რომელიც გარდამავალ მდგომარეობას შეესაბამება.

არსებობს რამოდენიმე მეთოდი, რათა თავიდან იქნას აცილებული სტრუქტურის ოპტიმიზაცია ლოკალური მინიმუმის წერტილში:

- სტრუქტურის გეომეტრია უნდა შეიცვალოს მნიშვნელოვნად და თავიდან განხორციელდეს მინიმიზაცია
- უნდა ჩატარდეს მოლეკულური დინამიკის გაანგარიშება, ხოლო შემდეგ ინდივიდუალური სტრუქტურებისათვის გეომეტრიული ოპტიმიზაცია.

## 7.8. თვისებების ანგარიში

ზპე-ის საშუალებით შესაძლებელია გაანგარიშებულ იქნას შემდეგი მახასიათებლები: სტერიული ენერგია, წარმოქმნის სითბო, დიპოლური მომენტი, მუხტის სიმკვრივე,

ელექტროსტატიკური პოტენციალები, ელექტრონის სპინის სიმკვრივე, ზემოქმედების კონსტანტები, ატომური მუხტები, პოლარიზებადობა, რხევითი სიხშირეები და სხვა.

### 7.9. მექანიკური დინამიკა (მოკლე მიმოხილვა)

მოლეკულური მექანიკა აღწერს მოლეკულის პოტენციურ ენერგიას ფუნქციის კლასიკური გზით მიღებული მწკრივის საშუალებით. პოტენციური ენერგიის ფუნქციები და პარამეტრები კი იყენებენ ე.წ. „ძალურ ველებს“. მოლეკულური მექანიკის მეთოდები შემდეგ პრინციპებზეა დაფუძნებული:

- ბირთვი და ელექტრონი არის შერწყმული და განხილვა წარმოებს უნიფიცირებულ ნაწილაკზე;
- ატომის მაგვარ ნაწილაკს აქვს სფეროსებრი ფორმა;
- ნაწილაკები ერთმანეთთან დაკავშირებული არიან ოსცილატორებით (ზამბარებით);
- ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება, რომლებიც ერთმანეთთან უშუალოდ არ არიან დაკავშირებულნი, განიხილება კლასიკური მექანიკის კანონებით;
- ინდივიდუალური პოტენციური ფუნქციები გამოიყენება სხვადასხვა ურთიერთქმედების აღწერისათვის: ბმის რხევა, ბმის კუთხის ცვლილება და ტორსული (ბმის გრეხვა) ენერგიები და ასევე არაბმული ურთიერთქმედებები;
- პოტენციური ენერგიის ფუნქციები ემყარება ემპირიულად მიღებულ პარამეტრებს (ძალურ კონსტანტას, წონასწორობის სიდიდეს), რომლებიც ატომთა მწკრივის ურთიერთქმედებებს აღწერენ;
- ატომის ტიპის ნაწილაკების სივრცით განაწილებას მათი ურთიერთქმედებების ჯამური სიდიდე განსაზღვრავს;
- მოლეკულურ მექანიკურ ენერგიას არ გააჩნია საკუთარი ფიზიკური მნიშვნელობა. იგი გამოიყენება მხოლოდ ერთიდაიგივე მოლეკულის ორი ან მეტი კონფორმერის სტერიული ენერგიების შედარებისათვის.

### 7.10. კალური ველი

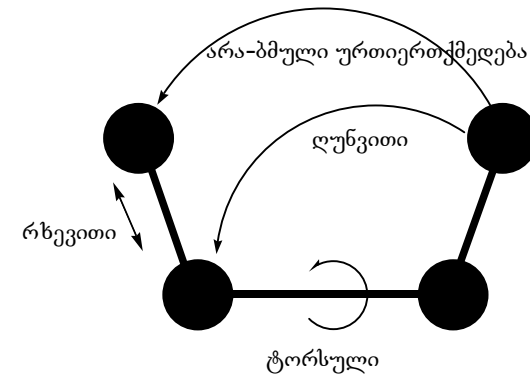
მოლეკულური მექანიკა მოლეკულას განიხილავს როგორც ზამბარებით დაკავშირებულ სფეროებს. ზამბარების (ბმების) დეფორმაციის უნარი (გაჭიმვა-შეკუმშვა, მოლუნვა-გაშლა, გრეხვა) აღიწერება ჰუკის კანონით. არაბმული ატომები კი ურთიერთქმედებენ ვან დერ ვაალსის მიზიდულობით, სტერიული განზიდვით და ელექტროსტატიკური მიზიდულობა-განზიდვით. ამ თვისებების მათემატიკური აღწერა ძალიან მარტივი იქნება, თუ ატომებს გარკვეული რადიუსის სფეროებად განვიხილავთ.

მოლეკულის ჯამური პოტენციური ენერგია შეიძლება განხილულ იქნას, როგორც ჯამი შემდეგი ცალკეული ურთიერთქმედებებისა:

$$\text{ენერგია} = \text{სტერიული ენერგია} + \text{ლუნვითი ენერგია} + \text{ტორსული ენერგია} + \text{არაბმული ატომების ურთიერთქმედების ენერგია}$$

ჩამოთვლილი ურთიერთქმედებები სქემატურად გამოსახული არის ნახ. 67-ზე:

გარდა აღნიშნული ურთიერთქმედებებისა, პოტენციური



ნახ. 67. ატომებს შორის ურთიერთქმედების სახეები

ენერჯის ზოგიერთი ფუნქცია იყენებს დამატებით კიდევ სხვა სახის დეფორმაციებს (მაგალითად როგორცაა დეფორმაცია, რომელშიც შერწყმულია ბმის სიგრძისა და კუთხის ერთდროული რხევა). ასეთი ურთიერთქმედების შემოტანა კიდევ უფრო საიმედოსა და ზუსტს ხდის მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშებებს, თუმცა მნიშვნელოვნად ართულებს გათვლებს.

მოლეკულური მექანიკის მიერ გამოყენებული MM2 მეთოდი წარმოადგენს ალინგერის მეთოდის მოდიფიკაციას. ბმისა და ბმის კუთხის რხევითი ენერჯიების გაანგარიშება კი ჰუკის კანონის მიხედვით წარმოებს. პირველი მათგანის საანგარიშო ფორმულა არის:

$$E_{რხევა} = 71.94 \sum_{ბმები} K_s (r - r_0)^2$$

$K_s$  პარამეტრი წარმოადგენს ბმის ძალურ კონსტანტას, ხოლო  $r_0$  კი - წონასწორობის მანძილს. ორივე სიდიდე უნიკალურია ბმის ყოველი ტიპისათვის (C-C, C-H, O-C და სხვა). რიცხვითი კოეფიციენტი (71.94) უზრუნველყოფს ენერჯიის განზომილების გარდაქმნას კკალ/მოლებში.

მსგავსი ფორმულა გამოიყენება ბმის კუთხის ენერჯიის საანგარიშოდ:

$$E_{ლუნვა} = 0.02191418 \sum_{კუთხეები} K_b (\Theta - \Theta_0)^2$$

$K_b$  პარამეტრი ახასიათებს კუთხის დეფორმაციის სიადვილეს და ანგულარული ძალური კონსტანტის სახელით მოიხსენიება. იგი, წონასწორობულ კუთხის სიდიდესთან ( $\Theta_0$ ) ერთად წარმოადგენს უნიკალურ პარამეტრს ბმის თითოეული ტიპისათვის, ხოლო რიცხვითი კოეფიციენტი ემსახურება ენერჯიის განზომილების გადაყვანას კკალ/მოლებში.

**ტორსული ენერჯია**, რომელიც ახასიათებს ორწახნაგა კუთხის ცვლილებას, გაიანგარიშება შემდეგი ფორმულით:

$$E_{გრეხვა} = \sum_{ტორსული კუთხეები} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \phi)]$$

$V_n/2$  პარამეტრი არის ტორსული ძალური კონსტანტა. არაბმული ატომების ურთიერთქმედებით გამოწვეული ენერჯია წარმოადგენს წყვილ-წყვილად აღებულ ნებისმიერ

i-ურ და j-ურ წინასწარ განსაზღვრულ მანძილზე ნაკლები დისტანციით დაცილებულ ატომთა ურთიერთქმედების ენერჯიის ჯამს.

**ვან დერ ვაალსის ენერჯია**. ორ არაბმულ ატომს შორის, თუ ისინი გარკვეული დისტანციით არიან დაშორებულნი, აღიძვრება ურთიერთქმედება, რომელსაც ვან დერ ვაალსის ურთიერთქმედება ეწოდება. როდესაც ორ ასეთ ატომს შორის მანძილი მცირდება, აღიძვრება განზიდვის ძალა, ხოლო მანძილის გაზრდისას კი - მიზიდულობის ძალა. ვან დერ ვაალსის ენერჯია იანგარიშება შემდეგი ფორმულით:

$$E_{ვან დერ ვაალსი} = \sum_i \sum_j \epsilon (2900000e^{-12.5/R} - 2.25R^{-6})$$

$$სადაც R = \frac{r_{ij}}{R_i^* + R_j^*}$$

უკანასკნელ ფორმულაში  $R_i^*$  და  $R_j^*$  არის შესაბამისი ატომის ვან დერ ვაალსის რადიუსი,  $\epsilon$  ახასიათებს ატომების ურთიერთქმედების ბუნებას, ხოლო  $r_{ij}$  არის ატომებს შორის აქტუალური დისტანცია.

**ვან დერ ვაალსის ურთიერთქმედების შეზღუდვები**. ვან დერ ვაალსის ურთიერთქმედება, როგორც იყო აღნიშნული, განიხილება ნებისმიერ ორ ატომს შორის, რომელიც ერთმანეთთან უშუალოდ არ არის დაკავშირებული ბმით. ამდენად, დიდი ზომის მოლეკულაში, აღნიშნული ურთიერთქმედებები იქნება უამრავი, რაც მნიშვნელოვნად გაართულებს გაანგარიშების პროცესს. ამიტომ, შემოღებულია შეზღუდვები. კერძოდ, წინასწარ არის განსაზღვრული მანძილი, რომლის გარეთაც ვან დერ ვაალსის ურთიერთქმედება აღარ განიხილება. მრავალატომიანი სისტემებისათვის აღნიშნული შეზღუდვების შემოღების გამო გაანგარიშების პროცესი მნიშვნელოვნად მარტივდება.

**ელექტროსტატიკური ენერჯია**. იგი იანგარიშება შემდეგი ფორმულით:

$$E_{ელექტროსტატიკური} = \sum_i \sum_j \frac{q_1 q_2}{D r_{ij}}$$

ელექტროსტატიკური ენერგია არაბმულ ატომთა მუხტების ( $q_1, q_2, \dots$ ), ატომთშორისი მანძილისა ( $r_{ij}$ ) და მოლეკულის დიელექტრიკული შეღწევადობის ურთიერთდამოკიდებულების ფუნქციაა.

ელექტროსტატიკურ ურთიერთქმედებაში მხედველობაში მიიღება გარემოს (გამხსნელის) გავლენაც მოლეკულაზე. ატომების ურთიერთგავლენა შეიძლება დაიყოს ცალკეული ურთიერთქმედებების სახით, რომლებიც იანგარიშებიან თავ-თავისი ფორმულებით:

- მუხტი-მუხტის ურთიერთქმედება:

$$E = 332.05382 \sum_i \sum_j \frac{q_1 q_2}{D_y r_{ij}}$$

- დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედება

$$E = 14.383 \sum_i \sum_j \frac{\mu_i \mu_j}{D_\mu r_{ij}^3} (\cos x - 3 \cos \alpha_i \cos \alpha_j)$$

სადაც  $\alpha_i$  და  $\alpha_j$  არის კუთხე ორ დიპოლს ( $\mu_1$  და  $\mu_2$ ) შორის, რომელსაც წარმოქმნის  $r_{ij}$  ვექტორი;  $D_\mu$  არის ეფექტური დიელექტრიკული კონსტანტა;

- დიპოლ-მუხტის ურთიერთქმედება

$$E = 69.120 \sum_i \sum_j \frac{q_i \mu_j}{r_{ij}^2 \sqrt{D_\mu D_q}} (\cos \alpha_i)$$

როგორც ვან დერ ვაალსის ურთიერთქმედებისას, ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედების დროსაც აუცილებელია შემოღებულ იქნას შეზღუდვები, რის წყალობითაც გამოთვლების სიჩქარე მნიშვნელოვნად იზრდება. შეზღუდვების მიზანია გამორიცხული იქნას ერთმანეთისაგან მნიშვნელოვანი მანძილით დაცილებული ატომების ურთიერთგავლენა. მაგალითად,  $r$  მანძილით დაცილებული ორი ნაწილაკის მუხტი-მუხტი ურთიერთქმედება პროპორციული არის  $1/r$  სიდიდისა და მოლეკულის ზომიდან გამომდინარე ნულისაკენ მიიწვრთვება 30-40Å მანძილზე. მუხტი-დიპოლი და დიპოლ-დიპოლი ურთიერთქმედება კი უფრო მცირე მანძილზე წყვეტს არსებობას (18-25Å).

**სიბრტყის გარეთ გადაფარვა.** მოლეკულების, რომლებიც იმყოფებიან  $sp^2$  ჰიბრიდულ მდგომარეობაში, დასახასიათებლად აუცილებელია შემოღებულ იქნას სიბრტყის გარეთ გადაფარვის მცნება. როგორც ცნობილია, p-ლრუბლები, რომლებიც პერპენდიკულარულად არიან მიმართულნი სიბრტყის მიმართ, ერთმანეთს გადაფარავენ გვერდიდან. აღნიშნული ურთიერთქმედების (გადაფარვის) ენერგია MM2 მეთოდში იანგარიშება შემდეგი ფორმულით.

$$E = \sum_{\substack{\text{სიბრტყის} \\ \text{გარეთ} \\ \text{გადაფარვა}}} K_b [(\theta - \theta_0)^2 + SF(\theta - \theta_0)^6]$$

სადაც SF არის მეექვსე რიგის კონსტანტა, რომლის მნიშვნელობები მოცემულია MM2 მეთოდის პარამეტრიზაციის ფაილში.

**$\pi$ -ბმები.** მოლეკულებისათვის, რომლებიც შეიცავენ  $\pi$ -ბმებს, MM2 მეთოდი იყენებს პარიზერ-პარ-პოპლის (ე.წ. PPP-მეთოდი)  $\pi$ -ორბიტალთა ანგარიშის მეთოდს.  $\pi$ -სისტემა განისაზღვრება სამი ან მეტი ატომის მწკრივისაგან, რომლებსაც აქვთ შეუღლებული  $\pi$ -სისტემა. ამიტომ MM2 მეთოდის დროს ბმის რიგის გაანგარიშებისას შეიძლება მიღებულ იქნას მნიშვნელობები 1, 1.5, 2 და ა.შ.

## 7.11. მოლეკულური დინამიკის სიმულაცია

მოლეკულური დინამიკა, ამ მცნების ფართო გაგებით, ეხება მოლეკულების მოძრაობის სიმულაციას. მოლეკულების მოძრაობა ქიმიური პროცესებისათვის განუყოფელი ფენომენია. მაგალითის სახით შეიძლება უამრავი შემთხვევის მოყვანა: უმარტივესი ვიბრაცია, როგორცაა ბმის სიგრძისა და კუთხის ცვალებადობა, იძლევა მოლეკულების იწ სპექტრებს. ქიმიური რეაქციები, ჰორმონი-აქცეპტორის ერთმანეთთან დაკავშირება და სხვა უფრო რთული პროცესები დაკავშირებულია სხვადასხვა სახის შიდა - თუ მოლეკულათშორის მოძრაობასთან.

MM2 მეთოდი მოლეკულების დინამიკის სიმულაციისათვის იყენებს ნიუტონის კანონებს.

მოლეკულური დინამიკის ძირითადი შესწავლის საგანს წარმოადგენს კონფორმაციული გარდაქმნები და ლოკალური ვიბრაციები. იგი საფეხურებრივად ითვლის მოლეკულის თავისუფლების ხარისხს. გაანგარიშებისას კი ეს საფეხურები წარმოადგენენ ატომების პოზიციების ცვლილებას. ამ უკანასკნელ შემთხვევაში მათ გააჩნიათ გარკვეული კინეტიკური ენერჯია.

ქიმიური პროცესების მამოძრავებელი ძალა იანგარიშება თერმოდინამიკის კანონების საშუალებით, ხოლო ქიმიური რეაქციის მექანიზმს კი კინეტიკა აღწერს.

მოლეკულური დინამიკის გაანგარიშება წარმოადგენს ფიქსირებული ინტერვალების საფეხურების ერთობლიობას ( $2.0 \times 10^{-15}$  წმ). ყოველი  $i$ -ური ატომის გადაადგილება  $x$ -ღერძის მიმართ იანგარიშება ბიძენის ინტეგრალური ალგორითმით შემდეგი ფორმულის თანახმად:

$$x_i = x_i + V_i \Delta t + (5a_i - a_i^{\circ}) (\Delta t)^2 / 8$$

$y$  და  $z$  ღერძის მიმართ გადაადგილებაც აღიწერება ანალოგიური ფორმულით. მოყვანილ ფორმულაში  $x_i$  (შესაბამისად  $y_i$  და  $z_i$ ) არის დეკარტის კოორდინატები,  $V_i$ - სიჩქარე,  $a_i$  - აჩქარება,  $a_i^{\circ}$  - აჩქარება წინა საფეხურზე,  $\Delta t$  დროის მონაკვეთი წინა და მიმდინარე საფეხურებს შორის.

შემდგომ ეტაპზე იანგარიშება პოტენციური ენერჯია და მისი წარმოებული ( $g_i$ ), რომელიც თავის მხრივ წარმოადგენს კოორდინატების შემდგომი ანგარიშის საფუძველს. ყოველი ახალი აჩქარება და სიჩქარე შესაბამის საფეხურზე იანგარიშება შემდეგი ფორმულებით:

$$a_i^{\circ} = a_i^{\circ}; a_i^{\circ} = a_i; a_i = -g_i / m_i; V_i = V_i + (3a_i + 6 a_i^{\circ} - a_i^{\circ}) \Delta t / 8$$

## 7.12. ქვანტური მექანიკის მოკლე მიმოხილვა

წინამდებარე თავში განხილული იქნება მხოლოდ ის ძირითადი ასპექტები და ტერმინოლოგია, რომლებსაც იყენებს ქვანტური მექანიკა, რათა ზოგადი წარმოდგენა შეგვექმნას ანგარიშის ნახევარემპირიულ და *ab initio* მეთოდებზე და ასევე მათ მიახლოებებზე.

ქვანტურ-მექანიკური მეთოდები მოლეკულას აღწერს ბირთვებისა და ელექტრონების ურთიერთგავლენის მცნებებით.

როგორც *ab initio*, ისე ნახევარემპირიული მეთოდი დაფუძნებულია შემდეგ პრინციპებზე:

- ბირთვები და ელექტრონები არიან ერთმანეთისაგან განსხვავებულნი;
- ელექტრონ-ელექტრონის და ელექტრონ-ბირთვის ურთიერთქმედება არის ზღვრული;
- ურთიერთქმედება არის განპირობებული ბირთვებისა და ელექტრონების მუხტებისა და ელექტრონების მოძრაობის გამო;
- ურთიერთქმედებები განაპირობებს ბირთვებისა და ელექტრონების და მათი ენერჯიის თავისებურ განაწილებას;
- ქვანტურ-მექანიკური მეთოდები იყენებენ შრე-დინგერის ტალღური ფუნქციის მიახლოებით ამოხსნას

$$H\psi = E\psi$$

- ჰამილტონიანის ოპერატორი ( $H$ ) შეიცავს ინფორმაციას ელექტრონებისა და ბირთვების შესახებ სისტემაში. ელექტრონის ტალღური ფუნქცია ( $\psi$ ) აღწერს ელექტრონის მოძრაობას ან მდებარეობას.  $E$  არის ენერჯია, რომელიც შეესაბამება ელექტრონის გარკვეულ კონკრეტულ მდებარეობას;
- შრედინგერის განტოლების ზუსტი ამონახსენი არსებობს მხოლოდ ერთი ბირთვისა და ერთი ელექტრონის შემცველი სისტემისათვის. მიუხედავად ამისა, იგი წარმოადგენს საფუძველს ნებისმიერი რთული სისტემის გაანგარიშებისათვის;
- ამონახსენი აღწერს ელექტრონის შესაძლო მდგომარეობების სიმრავლეს. აღნიშნული მდგომარეობების სიმრავლე კი განისაზღვრება ალბათური ფუნქციით, რომელიც წარმოადგენს ტალღური ფუნქციის კვადრატს

$$\int \Psi^2(r) dr = 1$$

სადაც  $r$  არის რადიუსი ( $x, y$  და  $z$ )

- ალბათურ ფუნქციას აქვს უამრავი ამონახსენი. ეს ამონახსენები იწოდებიან ატომური ორბიტალების, ხოლო მათი ენერგიები - ორბიტალური ენერგიების სახელწოდებით.

### ჰამილტონიანის მიახლოებები.

პირველი მიახლოების დაშვება განხორციელდა ბორ-ოპენჰეიმერის მიერ, რომელიც ერთმანეთისაგან მიჯნავს ელექტრონებისა და ბირთვის ენერგიების ურთიერთქმედებას. ელექტრონისა და ბირთვის მასებს შორის დიდი განსხვავების გამო, ითვლება რომ ბირთვი პრაქტიკულად უძრავია ელექტრონის მიმართ, ანუ სხვაგვარად რომ ვთქვათ, ელექტრონი მოძრაობს უძრავი ბირთვის გარშემო. ეს კი საშუალებას იძლევა, ელექტრონის ენერგია გამოთვლილ იქნას ბირთვის ენერგიისაგან განცალკევებით ელექტრონის ჰამილტონიანის საშუალებით.

შრედინგერის განტოლების ელექტრონული მოდელი შემდეგი სახისაა:

$$H_{\text{ელექტრ}} \Psi_{\text{ელექტრ}} = E_{\text{ელექტრ}} \Psi_{\text{ელექტრ}}$$

შემდგომი მიახლოებით ერთ რომელიმე ელექტრონზე მოქმედებს ველი, რომელიც შექმნილია ერთდროულად ყველა დანარჩენი ელექტრონისა და ბირთვის მიერ.

ითვლება, რომ ყოველი ელექტრონი თავის საკუთარ ორბიტაზე არის თავისუფალი და არ განიცდის მისი მეზობელი ელექტრონების გავლენას.

ამდენად, ელექტრონული ჰამილტონიანი კიდევ უფრო მარტივდება და იღებს ერთი ელექტრონის ჰამილტონიანის სახეს. ასეთი ჰამილტონიანის ამოხსნა კი უკვე შესაძლებელია.

$$H_{\text{ელექტრ.}} = \sum_i H_i^{\text{ჰ}}^{\text{ჰ}}$$

$$H_i^{\text{ჰ}}^{\text{ჰ}} \psi = \epsilon \psi$$

აქედან გამომდინარე, მოლეკულური სისტემებისათვის მიიღება ერთი ელექტრონის ჰამილტონიანის მატრიცა. ორი ატომური ორბიტალის მქონე სისტემისათვის გვექნება:

$$H_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu} H^{\text{ჰ}}^{\text{ჰ}} \phi_{\nu} d\tau$$

მაგრამ მოლეკულურ სისტემებში აღნიშნული ჰამილტონიანი არ აღწერს არც ორ და მეტი ელემენტის მქონე სისტემის ურთიერთქმედებას და არც ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედებას. ამიტომ, იგი მოდიფიცირებული იქნა შემდეგნაირად:

$$F\psi = E\psi$$

სადაც  $F$  არის ფოკის ოპერატორი და იგი აჯამებს ერთი ელექტრონის ჰამილტონიანებს, რომელიც აღწერს ერთ ელექტრონსა და ერთ ელემენტს. მასში არის გათვალისწინებული აგრეთვე ორ ელექტრონს შორის ურთიერთგავლენა.

**ტალღური ფუნქციის შეზღუდვა.** მრავალი ელექტრონის მქონე მოლეკულური ორბიტალისათვის (მო) ელექტრონის ტალღური ფუნქცია ( $\psi$ ) იმგვარადაა გარდაქმნილი, რომ აკმაყოფილებდეს შემდეგ მოთხოვნებს:

- $\psi$  ფუნქცია დაყვანილი უნდა იყოს შემდეგ სახემდე  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dv = n$ , სადაც  $n$  არის ელექტრონების რიცხვი,  $b$  - დაყვანის კოეფიციენტი,  $\psi^2$  - სიმკვრივის ალბათობა. ეს ყოველივე კი უზრუნველყოფს, ელექტრონის არსებობას საწყის მდგომარეობაში;
- $\psi$  უნდა იყოს ანტისიმეტრიული, რაც ნიშნავს, რომ მან უნდა შეიცვალოს ნიშანი, თუ ადგილებს შეიცვლიან ელექტრონები შევსებულ მოლეკულურ ორბიტალზე. ეს მოთხოვნა გამომდინარეობს პაულის აკრძალვის პრინციპიდან.

**სპინური ფუნქცია.** სპინური ფუნქციები  $\alpha$  და  $\beta$  წარმოადგენენ ელექტრონის ნებარდართული მოძრაობის მდგომარეობას  $-1/2$  და  $+1/2$  სპინების სახით. ამ ფუნქციის ამონახსენი ( $\Phi_I$ ) ახასიათებს მო-ს და სპინის ფუნქციას.

**ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაცია (აოწკ).** ჰარტი-ფოკის განტოლების ამოხსნა, მიუხედავად იმისა, რომ შესაძლებელია ამოიხსნას ატომებისათვის, მიუღებელია მოლეკულებისათვის. მოლეკულური ორბიტალების ანგარიშისათვის

მიღებულია ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის მიახლოებითი მეთოდი. ამ მეთოდით, ცალ-ცალკე იანგარიშება ატომური ორბიტალები, რომელთა წრფივი კომბინაცია (ჯამი) იძლევა მიზნობრივ მო-ს.

$$\psi_i = \sum_v c_{vi} \phi_v$$

**რუუტენ-ჰოლის მატრიცული განტოლება.** რუუტენ-ჰოლის მატრიცულ განტოლებას აქვს შემდეგი სახე:

$$FC=SCE$$

იგი შეიცავს ფოკის მატრიცას (F), მოლეკულური ორბიტალების კოეფიციენტების მატრიცას (C), რომელიც მიღებულია აოწკ-ით, ზედდებული მატრიცას\* (S) და მოლეკულური ორბიტალების ენერგიების დიაგონალიზებულ მატრიცას (E). ვინაიდან, ფოკის განტოლება არის მოლეკულური ორბიტალების ფუნქცია, ზემომოყვანილი ფორმულის კომპონენტები არ არის წრფივად ურთიერთდამოკიდებული.

**ab initio მეთოდი.** ab initio („პირველსაწყისი პრინციებიდან გამომდინარე“) მეთოდი ტალღური განტოლების აგებისათვის იყენებს ფოკის ოპერატორის სრულ სახეს.

ნახევარემპირიული მეთოდი კი იყენებს ფოკის ოპერატორის გამარტივებულ სახეს, რომელშიც ერთი ელექტრონის მატრიცული ელემენტი და ორი ელექტრონის ინტეგრალი არის შეცვლილი ემპირიულად მიღებული პარამეტრებით.

ერთი ელექტრონის ნახევარემპირიული მეთოდი იყენებს ერთი ელექტრონის ჰამილტონიანს, ხოლო ორი ელექტრონის ნახევარემპირიული მეთოდი კი შესაბამისად ორი ელექტრონის ჰამილტონიანს, რომელიც ითვალისწინებს ელექტრონების განზიდვის მომენტსაც.

**გაფართოებული ჰიუკელის მეთოდი.** ჰიუკელის მოლეკულური ორბიტალების მეთოდის საფუძველზე შემუშავებულ იქნა გაფართოებული ჰიუკელის მეთოდი, რომელიც წარმო-

\* ზედდებული მატრიცა არის კვადრატული მატრიცა, რომელსაც იყენებს გამოთვლითი ქიმიის და აღწერს ქვანტური სისტემების ბაზური ვექტორების მწკრივის ურთიერთდამოკიდებულებას

ადგენს ერთ-ერთ პირველ ერთ-ელექტრონიან ნახევარემპირიულ მეთოდს, რომელიც აერთიანებს როგორც  $\sigma$ , ისე  $p$  ვალენტურ სისტემებს. აღნიშნული მეთოდი დღეისათვის ფართოდ გამოიყენება, რადგან კარგ შედეგებს იძლევა ორგანული, მეტალორგანული და არაორგანული ნაერთების ძირითადი მდგომარეობებისათვის.

გაფართოებული ჰიუკელის მეთოდის (EH – Extended Hamiltonian) გამოყენება შესაძლებელია მოლეკულური ზედაპირის სურათის შემუშავებისათვის.

ანგარიში წარმოებს შემდეგი ფორმულის მიხედვით:

$$H_{\mu\nu} = -I_{\mu}$$

$$H_{\mu\nu} = 0.5K(H_{\mu\mu} + H_{\nu\nu})S_{\mu\nu} \quad \mu \neq \nu$$

სადაც  $I_{\mu}$  არის  $\mu$  ორბიტალის ვალენტური მდგომარეობის იონიზაციის ენერგია.

### 7.13. CS MOPAC-ში გამოყენებული მეთოდები

MOPAC გაანგარიშებისას იყენებს შემდეგ სახის მიახლოებებს:

- RHF - ეს არის ჰარტი-ფოკის ცნობილი მეთოდი, რომელიც მოლეკულას განიხილავს როგორც ჩაკეტილ სფერულ სისტემას და ამდენად უშვებს სპინურ შეზღუდვებს. ეს უკანასკნელი კი მნიშვნელოვნად ამარტივებს ფოკის მატრიცას.
- UHF - ეს მეთოდი  $\alpha$  და  $\beta$  ელექტრონებს (სპინებით  $+1/2$  და  $-1/2$ ) განიხილავს ცალ-ცალკე, კერძოდ მათ განათავსებს შესაბამის ორბიტალებზე, რის გამოც  $\alpha$  და  $\beta$  ელექტრონებს აქვს განსხვავებული ენერგია. UHF მეთოდი შეიძლება ჩატარებულ იქნას როგორც ჩაკეტილ, ისე ღია სისტემებზე, თუმცა ანგარიშის დრო ბევრად დიდია წინა მეთოდთან შედარებით, რადგან ერთ ორბიტალზე არსებული ელექტრონების ცალ-ცალკე

განხილვისას ინტეგრალის ანგარიში ორჯერაა საჭირო.

MOPAC იყენებს ამოხსნის MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, MNDO-d მეთოდებს.

### MINDO/3 თეორია

MINDO/3 (Modified Intermediate Neglect of Diatomic Overlap revision 3) არის ერთ-ერთი ყველაზე ძველი მეთოდი. მას დღეისათვის ძირითადად მხოლოდ ისტორიული დანიშნულება გააჩნია. თუმცა ზოგიერთ გოგირდშემცველი ნაერთისათვის გაანგარიშება კარგ შედეგებს იძლევა.

ნახაზზე (ნახ. 68) მოცემულია ორატომიანი წყვილები, რომელნიც პარამეტრიზებული არიან MINDO/3 მეთოდში. X სიმბოლოთი აღნიშნულია ატომები, რომლებსთვისაც ანგარიში მისაღებია, ხოლო (x)-ით კი – ის შემთხვევები, როდესაც გაანგარიშების სიზუსტე საეჭვოა.

|    |     |     |   |   |   |    |   |   |    |   |
|----|-----|-----|---|---|---|----|---|---|----|---|
| H  | x   |     |   |   |   |    |   |   |    |   |
| B  | (x) | (x) |   |   |   |    |   |   |    |   |
| C  | x   | (x) | x |   |   |    |   |   |    |   |
| N  | x   | (x) | x | x |   |    |   |   |    |   |
| O  | x   | (x) | x | x | x |    |   |   |    |   |
| F  | x   | (x) | x | x | x | x  |   |   |    |   |
| Si | x   |     | x |   |   |    | x |   |    |   |
| P  | x   |     | x |   |   |    |   | x |    |   |
| S  | x   |     | x | x | x | x  |   |   | x  |   |
| Cl | x   |     | x | x | x |    |   | x | x  | x |
| H  | B   | C   | N | O | F | Si | P | S | Cl |   |

ნახ. 68. დიატომური პარამეტრიზება MNDO/3 მეთოდში

### MNDO თეორია

MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap) მეთოდი შეიძლება გამოყენებულ იქნას მუქი ფონით მოცემული ელემენტებისათვის:

|    |    |  |  |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|--|--|----|----|----|----|----|----|----|
| 12 |    |  |  |    |    |    |    |    |    | He |
| Li | Be |  |  |    | B  | C  | N  | O  | F  | Ne |
| Na | Mg |  |  |    | Al | Si | P  | S  | Cl | Ar |
| K  | Ca |  |  | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| Rb | Sr |  |  | Cd | In | Sn | Sb | Te | I  | Xe |
| Cs | Ba |  |  | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |

MNDO მეთოდში შემოღებულია შემდეგი სახის შეზღუდვები:

- სტერიულად გადატვირთული ნაერთები (მაგ. ნეოპენტანი) უმდგრადაა;
- ოთხ წევრიანი ციკლები მდგრადაა;
- ჰიპერვალენტური ნაერთები (მაგ. სულფომჟავები) ძლიერ უმდგრადაა;
- აქტივაციის ბარიერი ძალიან მაღალია;
- ბენზოლის ბირთვში ჩანაცვლებული ჟაგბადშემცველი ჩამნაცვლებლები სიბრტყიდანაა გამოსული.

### AM1 თეორია

AM1 (Austin Model 1) შეიძლება გამოყენებულ იქნას შემდეგი ელემენტების შემცველი ნაერთებისათვის:



|    |    |  |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|--|----|----|----|----|----|----|----|
| H  |    |  |    |    |    |    |    |    | He |
| Li | Be |  |    | B  | C  | N  | O  | F  | Ne |
| Na | Mg |  |    | Al | Si | P  | S  | Cl | Ar |
| K  | Ca |  | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| Rb | Sr |  | Cd | In | Sn | Sb | Te | I  | Xe |
| Cs | Ba |  | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |

AM1 მეთოდი არის MNDO მეთოდის ანალოგიური და შემუშავებულია ამ უკანასკნელის გაუმჯობესებით. კერძოდ, წყლის დიმერში წყალბადური ბმების რხევითი ენერგია შეადგენს 5,5 კკალ/მოლს, რაც ექსპერიმენტულ მონაცემებთან ახლოსაა. რეაქციის აქტივაციის ბარიერების ანგარიში უფრო დიდი სიზუსტით ხდება, ვიდრე MNDO მეთოდში. დახვეწილია მაღალი ვალენტობის ფოსფორშემცველი ნაერთების ანგარიში. AM1 მეთოდით  $\Delta H_f$  ენერგიის ანგარიშისას ცდომილება 40%-ით ნაკლებია MNDO მეთოდის ანგარიშის ცდომილებაზე.

### PM3 მეთოდი

PM3 (Parameterized Model revision 3) მეთოდის გამოყენება მიზანშეწონილია შემდეგი მუქი ფონით გამოხატული ელემენტების შემცველი ნაერთებისათვის:

|    |    |  |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|--|----|----|----|----|----|----|----|
| H  |    |  |    |    |    |    |    |    | He |
| Li | Be |  |    | B  | C  | N  | O  | F  | Ne |
| Na | Mg |  |    | Al | Si | P  | S  | Cl | Ar |
| K  | Ca |  | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| Rb | Sr |  | Cd | In | Sn | Sb | Te | I  | Xe |
| Cs | Ba |  | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |

PM3 მეთოდი მიღებულია AM1 მეთოდის პარამეტრიზებით და ამდენად წარმოადგენს შედარებით გაუმჯობესებულ მეთოდს. მაღალვალენტური ნაერთების გაან-

გარიშება უფრო დიდი სიზუსტით წარმოებს AM1 მეთოდთან შედარებით.

## 7.14. მოლეკულური მექანიკის (MM2) ანგარიში

მოლეკულური მექანიკის ანგარიში წარმოებს პროგრამა Chem3D-ს (პაკეტი ChemOffice) საშუალებით.

მოდელის ფანჯარაში დავიტანოთ სტრუქტურა (იხ. სამგანზომილებიანი სტრუქტურების აგება, § 5.2.). სტრუქტურის აგების შემდეგ, მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშების დაწყებამდე აუცილებელია მოსამზადებელი სამუშაოების ჩატარება - ენერგიის მინიმიზაცია. ამისათვის გავააქტიუროთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერგიის მინიმიზაცია), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **MM2**. ეკრანზე ჩამოიშლება მენიუ, რომელიც მოიცავს შემდეგ ბრძანებებს:

- **Repeat MM2 Job** (გაიმეორე MM2 დავალება). აღნიშნული ბრძანება MM2 ანგარიშის შესრულებამდე მიუწვდომელია (იგი ეკრანზე ბაცი ფერით ჩანს). მისი გააქტიურება ხდება ავტომატურად მოლეკულური მექანიკის ანგარიშის შესრულების შემდეგ. მისი დანიშნულებაა გაიმეორებულ იქნას მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშება წინა გაანგარიშებისას შერჩეული პარამეტრებით.
- **Run MM2 Job** (MM2 დავალების შესრულება) - ბრძანების გააქტიურება იძახებს ეკრანზე დიალოგის ფანჯარას, რომლის საშუალებითაც უნდა ავირჩიოთ MM2 დავალების შესრულების წინასწარშექმნილი ინციალიზაციის ფაილი, რომლის გაფართოებაც არის \*.jdf (Job description file). მასში ინახება ძირითადი პარამეტრები, რომლის მიხედვითაც წარმოებს ანგარიში.
- **Minimize Energy** (ენერგიის მინიმიზაცია) - შემუშავდება მოლეკულის ისეთი სტრუქტურა, რომელსაც ყველაზე მცირე ენერგია შეესაბამება. მისი გააქტიურების შემდეგ ეკრანზე გამოსულ დიალოგის ფანჯარაში ხდება გაანგარიშების ცდომილების შერჩევა (იგი ავტომატურად 0.1-ის ტოლია).

მაგალითის სახით განვიხილოთ ეთანის მოლეკულა. MM2 მეთოდის გამოყენებით შევადაროთ ერთმანეთს ეთანის ჩამოფარებული და დამუხრუჭებული კონფორმერები:

6. **File** (ფაილი) მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **New Model** (ახალი მოდელი). ეკრანზე გაიხსნება ახალი სუფთა სამუშაო გვერდი - მოდელის ფანჯარა.

7. ავირჩიოთ მოწყობილობა **A**-**Text Building** (ტექსტის აგება).

8. დავწკაპუნოთ თავუნას მარცხენა ღილაკი. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა კურსორით.

9. ავკრიფოთ ტექსტი: „CH3CH3“. Enter ღილაკის დაჭერის შემდეგ ტექსტი გარდაიქმნება სტრუქტურად.

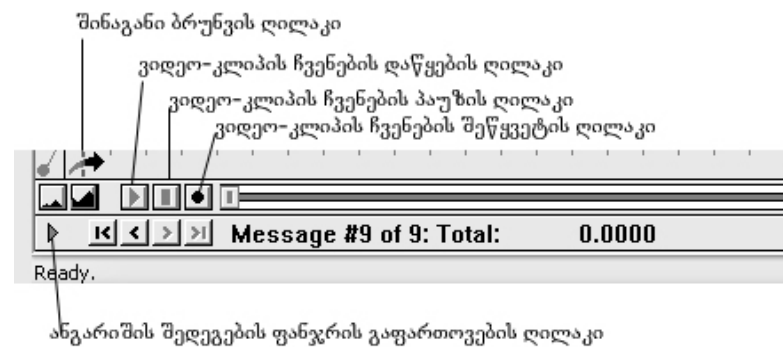
10. ატომების ნუმერაციისათვის (რათა ისინი ერთმანეთსაგან უკეთ იქნას გარჩეული) გავააქტიუროთ ჯერ მენიუ **Object** (ობიექტი), ხოლო შემდეგ ქვემენიუ - **Show serial numbers** (სერიული ნუმერაციის ჩვენება). ამ უკანასკნელი მენიუს გააქტიურების შემდეგ თავუნას მარცხენა ღილაკი დავაწკაპუნოთ ჩამრთველზე **Show** (ჩვენება)\*. სტრუქტურის ატომები ავტომატურად დაინომრება.

11. **MM2** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერგიის მინიმიზაცია). ყველა პარამეტრი დავტოვოთ უცვლელად და გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).

12. დაიწყება ანგარიში, რომლის ხანგრძლივობა დამოკიდებულია კომპიუტერის ტექნიკურ პარამეტრებზე. ანგარიში წყდება მაშინ, როდესაც გრადიენტის მნიშვნელობა მცირე იქნება 0.1-ზე. კალკულაციის დამთავრების შემდეგ, ანგარიშის ეკრანზე გამოტანა შესაძლებელია ანგარიშის შედეგების ფანჯრის გაფართოებით. ამისათვის, თავუნას ღილაკი უნდა დავაწკაპუნოთ ფანჯრის გაფართოების ღილაკზე, რომელსაც სამკუთხედის ფორმა აქვს (იხ.ნახ. 65).

ანგარიშის შედეგებს ექნება დაახლოებით შემდეგი სახე:

\* შენიშვნა! ნუმერაცია ხშირად არ ემთხვევა IUPAC-ის ნუმერაციას



ნახ. 69. ანგარიშის შედეგების ჩვენების ფანჯარა

|                          |               |        |
|--------------------------|---------------|--------|
| <input type="checkbox"/> | Stretch:      | 0.0282 |
| <input type="checkbox"/> | Bend:         | 0.0991 |
| <input type="checkbox"/> | Stretch-Bend: | 0.0139 |
| <input type="checkbox"/> | Torsion:      | 0.0000 |
| <input type="checkbox"/> | Non-1,4 VDW:  | 0.0000 |
| <input type="checkbox"/> | 1,4 VDW:      | 0.6768 |
| <input type="checkbox"/> | Total:        | 0.8180 |

რიცხვითი მონაცემები შეიძლება უმნიშვნელოდ განსხვავებული იყოს, რაც განპირობებულია კომპიუტერის პროცესორზე და მათემატიკურ თანაპროცესორზე.

ანგარიშის შედეგებიდან ჩანს, რომ კონფორმერის სრული ენერგია 0.8180 კკალ/მოლს უდრის, ხოლო 1,4-ვან დერ ვაალსის ენერგია კი - 0.6768 კკალ/მოლს.

იმისათვის რომ გავარკვიოთ თუ რომელ კონფორმერს შეესაბამება აგებული სტრუქტურა, საჭიროა ინახოს დიჰედრალური კუთხის მნიშვნელობა. ამისათვის მოვნიშნოთ ატომები H4, C1, C2 და H7. მონიშვნა წარმოებს Shift ღილაკის დაჭერის მდგომარეობაში თავუნას მარცხენა ღილაკზე დაწკაპუნებით. მონიშვნის შემდეგ ატომები ფერს იცვლიან.

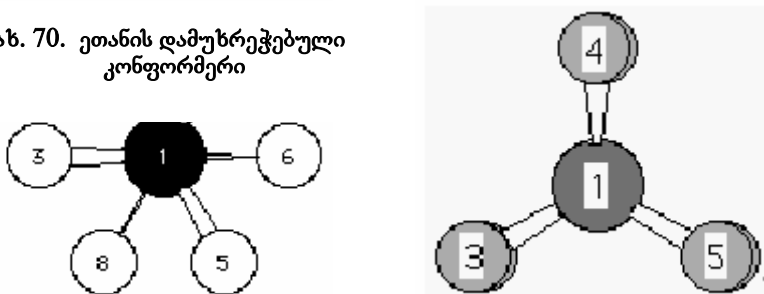
გავააქტიუროთ ბრძანება **Set Dihedral Angle** (დიჰედრალური კუთხის შერჩევა), რომელიც მოთავსებულია მენიუში

**Object (ობიექტი).** მოდელის ფანჯრის მარჯვნივ გაიხსნება ახალი ფანჯარა, რომელშიც მოცემული იქნება დიჰედრალური კუთხის მნიშვნელობა -59.985.

ცხადია, ეს მნიშვნელობა შეესაბამება დამუხრუჭებულ კონფორმერებს, ანუ ენერგეტიკულად ყველაზე ხელსაყრელ სტრუქტურას.

აღნიშნულის ვიზუალური დემონსტრაციისათვის სტრუქტურა შემოვატრიალოთ ისე, რომ დაკვირვებად C1 ატომს უკან ჩამოეფაროს C2 ატომი (ნახ. 70).

ნახ. 70. ეთანის დამუხრუჭებული კონფორმერი



ჩამოფარებული კონფორმერის მიღებისათვის განზომილებების ცხრილში დიჰედრალური კუთხის მნიშვნელობაში შევიტანოთ „0“ და ხელახლა მივცეთ მინიმიზაციის ბრძანება **MM2** მენიუდან. მიღებული მოდელი მოცემულია ნახ. 71-ზე. ანგარიშს შემდეგი სახე ექნება:

|  |        |
|--|--------|
| <input type="checkbox"/> Stretch:      | 0.0438 |
| <input type="checkbox"/> Bend:         | 0.1954 |
| <input type="checkbox"/> Stretch-Bend: | 0.0244 |
| <input type="checkbox"/> Torsion:      | 2.1330 |
| <input type="checkbox"/> Non-1,4 VDW:  | 0.0000 |
| <input type="checkbox"/> 1,4 VDW:      | 1.1553 |
| <input type="checkbox"/> Total:        | 3.5519 |

როგორც ანგარიშის შედეგებიდან ჩანს, ჯამური ენერგია 3.5519 კკალ/მოლია, ხოლო განსხვავება ჩამოფარებულ და დამუხრუჭებულ ფორმებს შორის - 2.73 კკალ/მოლი. მიღებული მნიშვნელობა კარგად ეთანადება ექსპერიმენტულ მონაცემებს.

თუ დავაკვირდებით 1,4-ვან დერ ვაალსის ენერგიას (1,4 VDW), ვნახავთ, რომ მისი მნიშვნელობა იმატებს 0.6768 კკალ/მოლიდან 1.1553 კკალ/მოლამდე, რაც რა თქმა უნდა ლოგიკურია.

ახლა განვიხილოთ ციკლოჰექსანის მოლეკულა. შევადაროთ ერთმანეთს ტვისტ-ნავისა და სავარძლის (გლობალური მინიმუმი) კონფორმერები. ავავოთ სტრუქტურა წინა მაგალითის ანალოგიურად. ტექსტის შეტანის მოწყობილობაში ავკრიფოთ: „CH2(CH2)5“. მოდელის ფანჯარაში აიგება ციკლოჰექსანის მოლეკულა. სტრუქტურის „გასუფთავებისათვის“ შევასრულოთ ბრძანება **Clean Up Structure** (სტრუქტურის „გასუფთავება“) მენიუდან **Tools** (მოწყობილობები). ეს ბრძანება ენერგიის მინიმიზაციის მსგავსია, მაგრამ იგი მხოლოდ ბმებისა და ბმის კუთხეების სტანდარტულ მნიშვნელობებს იყენებს. სტრუქტურაში ყველა ბმის სიგრძე და კუთხე სტანდარტულ მნიშვნელობებს უტოლდება. ამის შემდეგ სტრუქტურა ვიზუალურად უფრო „ლამაზად“ გამოიყურება. ენერგიის მინიმიზაციის დროს კი ადგილი აქვს ბმების სიგრძეებისა და კუთხეების გაანგარიშებას და მათი სიდიდეების რეალურ მნიშვნელობებთან მიახლოებას. ამიტომ შემდეგი ბრძანებით უნდა შევასრულოთ ენერგიის მინიმიზაცია. ამისათვის გავააქტიუროთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერგიის მინიმიზაცია) მენიუდან **MM2**. როდესაც მინიმიზაცია დამთავრდება, სტრუქტურა შემოვაბრუნოთ ისე, რომ მან მიიღოს სურათზე ნაჩვენები სახე (ნახ. 72).

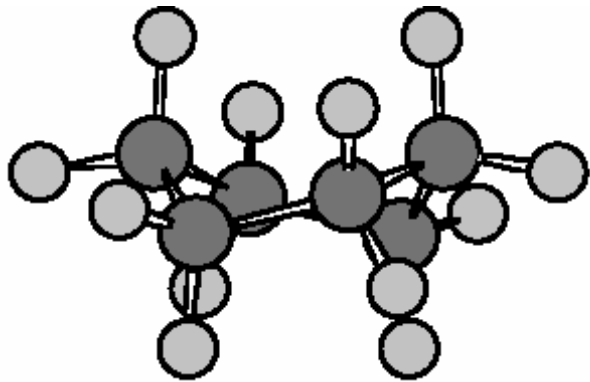
როგორც სურათიდან ჩანს, მიღებული კონფორმერი არ ეთანადება სავარძლის ფორმას (გლობალური მინიმუმს), არამედ იგი შეესაბამება ერთ-ერთ მდგრად კონფორმერს.

ანგარიშის შედეგები შემდეგი სახისაა:

|  |        |                                       |         |
|--|--------|---------------------------------------|---------|
| <input type="checkbox"/> Stretch:      | 0.4353 | <input type="checkbox"/> Non-1,4 VDW: | -0.8555 |
| <input type="checkbox"/> Bend:         | 0.7415 | <input type="checkbox"/> 1,4 VDW:     | 5.8904  |
| <input type="checkbox"/> Stretch-Bend: | 0.1291 | <input type="checkbox"/> Total:       | 11.9368 |
| <input type="checkbox"/> Torsion:      | 5.5960 |                                       |         |

ჯამურ ენერგიაში, ყველაზე დიდი წილი 1,4 ვან დერ ვაალსისა და ტორსულ ენერგიებს შეაქვთ.

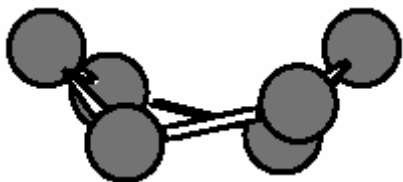
ცნობილია, რომ ციკლოპექსანისათვის დამახასიათებელია 6 მდგრადი კონფორმაციული სტრუქტურა, რომელიც შეესაბამება ლოკალურ მინიმუმის წერტილებს, ორი გლობალური მინიმუმის სტრუქტურა და მრავალი გარდამავალი მდგომარეობის კონფორმერი (რომელთა შორის ერთ-ერთი არის ნავის ფორმა).



ნახ. 72. ციკლოპექსანის ერთ-ერთი მდგრადი კონფორმერი

ახლა მოვძებნოთ, ციკლოპექსანის ყველაზე მდგრადი კონფორმერი, გლობალური მინიმუმის წერტილის შესაბამისი სტრუქტურა (სავარძლის ფორმა).

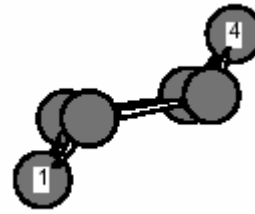
პირველ რიგში, ეკრანზე წარმოდგენილი ტვისტ-ფორმა რომ უფრო თვალსაჩინოდ წარმოჩინდეს, მას ჩამოვაცილოთ წყალბადატომები. ამისათვის საჭიროა გავაპასიუროთ ბრძანება **Show H's and Lp's** (*H-ის და Lp-ს ჩვენება*), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Tools** (*მოწყობილობები*). წყალბადატომების „გაქრობის“ შემდეგ ნახშირბადოვან ჩონჩხს შემდეგი სახე ექნება (ნახ. 73).



ნახ. 73. ციკლოპექსანის ერთ-ერთი კონფორმერი

მოენიშნოთ C1 ატომი და თავუნას საშუალებით ჩამოვიტანოთ სიბრტყის ქვემოთ, ხოლო C4 ატომი კი პირიქით - ავიტანოთ სიბრტყის ზემოთ. ამ ტრანსორმაციის შემდეგ, ცხადია, ირღვევა ბმის სიგრძეები და კუთხეები. ამიტომ ხელახლა შევასრულოთ ენერჯის მინიმიზაცია.

ანგარიშის დამთავრების შემდეგ სტრუქტურა შემოვაბრუნოთ იმგვარად, რომ სავარძლის ფორმა თვალნათლივ გამოჩნდეს (ნახ. 74):



- ☐ Strech: 0.3318
- ☐ Bend: 0.3623
- ☐ Strech-Bend: 0.0875
- ☐ Torsion: 2.1564
- ☐ Non-1,4 VDW: -1.0628
- ☐ 1,4- VDW: 4.6852
- ☐ Total: 6.5605

ნახ. 74. ციკლოპექსანის სავარძლის კონფორმერი

ანგარიშის შედეგებიდან ჩანს, რომ ენერჯიებს შორის განსხვავება შედგენს 5,5 კკალ/მოლს, რომელიც კარგ თანხვედრაშია ექსპერიმენტულ მონაცემებთან.

## 7.15. მოლეკულური დინამიკა

მოლეკულური დინამიკა ეფუძვნება ნიუტონის მექანიკის კანონებს და იძლევა ატომების მოძრაობის სიმულაციას, რომელიც თავის მხრივ უკავშირდება მოდელის კინეტიკურ ენერჯიას.

მოლეკულური დინამიკის გაანგარიშებისათვის საჭიროა აგებულ იქნას სტრუქტურა ჩვენთვის უკვე ცნობილი მეთოდებით და განხორციელდეს ენერჯის მინიმიზაცია ბრძანებით **Minimize Energy** (*ენერჯის მინიმიზაცია*). თუ საჭიროა სიმულაციის დროს თვალყური ვადევნოთ მიმდინარე სიდიდეებს, მაშინ აუცილებელია მოინიშნოს შესაბამისი ატომები.

ამასთან, **Analyze** (ანალიზი) მენიუდან ჩართული უნდა იქნას ბმის სიგრძისა (**Set Bond Length**) და ბმის კუთხის (**Set Bond Angle**) განზომილებები, რისთვისაც მონიშვნის ნიშანი დასვავთ ბრძანებების **Show** (ჩვენება) წინ.

ბოლოს გავააქტიუროთ ბრძანება **Molecular Dynamics** (მოლეკულური დინამიკა) მენიუდან **MM2**. გამონათებულ დიალოგის ფანჯარაში უცვლელად დავტოვოთ ყველა პარამეტრი და გავააქტიუროთ კალკულაციის დაწყების ღილაკი **Run** (გაშვება).

მაგალითისათვის განვიხილოთ პოლიფთორეთილენის მოლეკულისათვის მოლეკულური დინამიკის ტრაექტორია:

1. ავირჩიოთ ბრძანება **New Model** (ახალი მოდელი) მენიუდან **File** (ფაილი);
2. ავირჩიოთ ტექსტური აგების მოწყობილობა;
3. მოდელის ფანჯარაში ავკრიფოთ ტექსტი „F(C2F4)6F“.

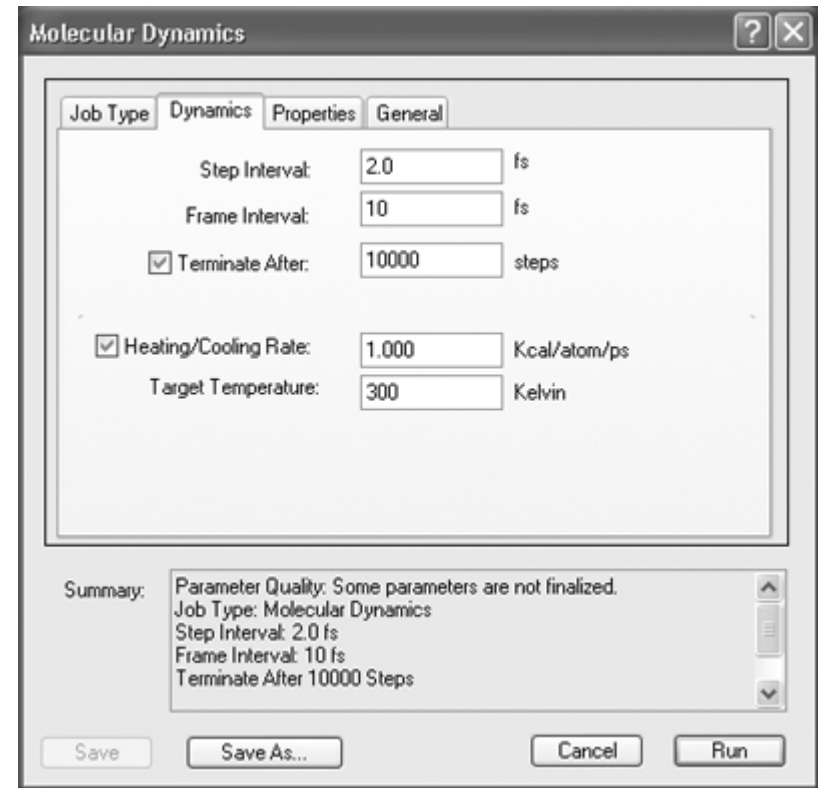
მოდელის ფანჯარაში აიგება პოლიფთორეთილენის სტრუქტურა.

ახლა შეიძლება უკვე განვახორციელოთ გაანგარიშება:

1. მოვნიშნოთ C2 და C33 ატომები (უკიდურესი მარჯვენა და მარცხენა ატომები - მონიშვნა შესაძლებელია Shift ღილაკის გამოყენებით).
2. მენიუდან **Object** (ობიექტი) ავირჩიოთ ბრძანება **Set Distance** (მანძილის შერჩევა). განზომილებების ცხრილში გამოჩნდება ატომებს შორის მანძილის მნიშვნელობები.

3. გავააქტიუროთ ბრძანება **Molecular Dynamics** (მოლეკულური დინამიკა) მენიუდან **MM2**. გამონათებულ დიალოგის ფანჯარა (ნახ. 75).

4. გადასართავით გავააქტიუროთ **Job Types** (დავალების



ნახ. 75. მოლეკულური დინამიკის ანგარიშის ფანჯარა

ტიპი) და მონიშვნის ნიშნები დასვავთ ბრძანებების **Record Each Iteration** (ყოველი მიახლოების ჩაწერა) და **Copy Measurements to Messages** (გაანგარიშების შედეგების შეტყობინების ფანჯარაში კოპირება).

5. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება). დაიწყება კალკულაცია. ანგარიშის დასრულების შემდეგ გავააქტიუროთ

შედეგების ფანჯრის გაფართოების ლილაკი (იხ. ნახ. 69). ანგარიშის შედეგებს ექნება შემდეგი სახე:

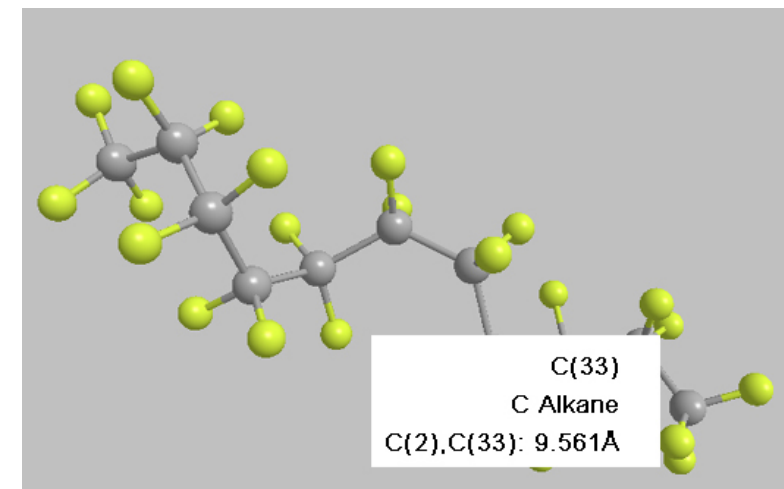
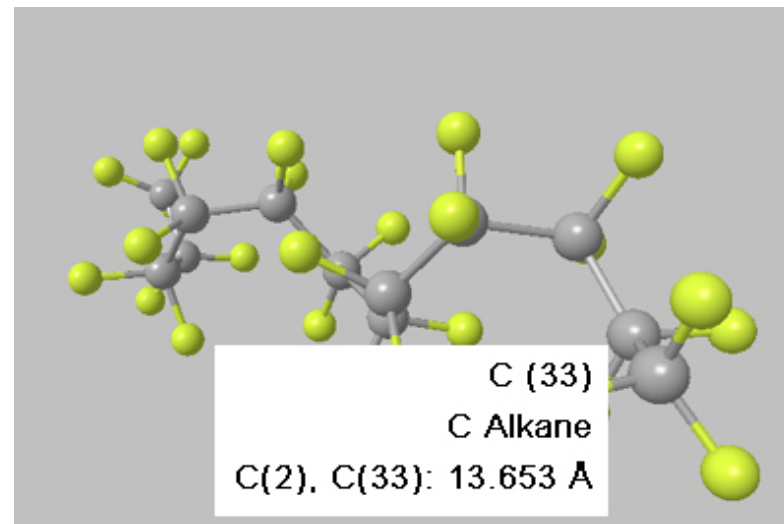
| Message      |                 |                  |                  |
|--------------|-----------------|------------------|------------------|
| Time         | Total Energy    | Potential Energy | Temperature      |
| □ C[2],C[33] | 9.394           |                  |                  |
| □ 0.010      | 571.079 ± 0.034 | 448.752 ± 70.785 | 1079.97 ± 625.00 |
| □ C[2],C[33] | 9.467           |                  |                  |
| □ 0.020      | 570.525 ± 0.223 | 352.146 ± 12.461 | 1927.97 ± 111.56 |
| □ C[2],C[33] | 9.595           |                  |                  |
| □ 0.030      | 570.168 ± 0.128 | 427.971 ± 18.783 | 1255.39 ± 166.74 |

6. დავაწკაპუნოთ ლილაკზე **Stop** (*შეჩერება*) (ნახ. 69), როდესაც 20-ზე მეტი ჩარჩო იქნება ნაანგარიშები.

ანგარიში შეჩერდება. ამის შემდეგ ჩვენ გვაქვს საშუალება, გავიმეოროთ ჩატარებული ანგარიში, როგორც ვიდეო კლიპი. ამისათვის მცოცი გადავადგილოთ საწყის მდგომარეობაში და გავააქტიუროთ **Start** (*დაწყება*) ლილაკი (ნახ. 69).

შედეგების ფანჯარაში თითოეული ჩარჩოსთვის აისახება შესაბამისი მნიშვნელობები. ამდენად, ჩვენ გვექნება საშუალება დავაკვირდეთ ანგარიშის მსვლელობის პროცესს.

ნახ. 76-ზე წარმოდგენილი ზედა სურათი შეესაბამება ანგარიშის დაწყებამდე არსებულ სტრუქტურას, ხოლო ქვედა კი - ანგარიშის შეწყვეტის შემდეგ მიღებულ სტრუქტურას. შევნიშნოთ, რომ C<sub>2</sub>-C<sub>33</sub> მანძილი 9.4Å-დან იცვლება 13.65Å-მდე.



ნახ. 76 პოლიფთორეთილენის მოდელი. ზედა სტრუქტურა შეესაბამება მოლეკულური დინამიკის გაანგარიშებამდე არსებულ მოდელს, ხოლო ქვედა სტრუქტურა კი - გაანგარიშების შემდგომ მოდელს.

ცხრილი 4. სპინური სიმკვრივის მიხედვით გამოყენებული დამატებითი ბრძანებები

| ელექტრონული მდგომარეობა   | სპინური მდგომარეობა | გამოყენებული ბრძანება |        |        |
|---------------------------|---------------------|-----------------------|--------|--------|
|                           |                     | OPEN(n1,n2)           | ROOT=n | C.I.=n |
| ძირითადი მდგომარეობა      | სინგლეტი            |                       |        |        |
|                           | დუბლეტი             | 1,2                   |        |        |
|                           | ტრიპლეტი            | 2,2                   |        |        |
|                           | კვარტეტი            | 3,3                   |        |        |
|                           | კვინტეტი            | 4,4                   |        |        |
|                           | სექსტეტი            | 5,5                   |        |        |
| I აღვზნებული მდგომარეობა  | სინგლეტი            |                       | 2      |        |
|                           | დუბლეტი             |                       | 2      | 2      |
|                           | ტრიპლეტი            |                       | 2      | 3      |
|                           | კვარტეტი            |                       | 2      | 4      |
|                           | კვინტეტი            |                       | 2      | 5      |
|                           | სექსტეტი            |                       | 2      | 6      |
| II აღვზნებული მდგომარეობა | სინგლეტი            |                       | 3      |        |
|                           | დუბლეტი             |                       | 3      | 3      |
|                           | ტრიპლეტი            |                       | 3      | 3      |
|                           | კვარტეტი            |                       | 3      | 4      |
|                           | კვინტეტი            |                       | 3      | 5      |
|                           | სექსტეტი            |                       | 3      | 6      |

α და β ელექტრონების სხვადასხვა კომბინაციას მივყავართ განსხვავებულ ელექტრონულ ენერგიებამდე. ეს კომბინაციები განიხილება, როგორც სპინური მულტიპლეტურობა. ქვემოთ მოყვანილ ცხრილში მოცემულია, კავშირი სპინური რიცხვსა და მულტიპლეტურობას შორის (ცხრილი 3).

სპინის მულტიპლეტურობის დადგენისათვის განხილულ უნდა იქნას:

- მოლეკულას წყვილი თუ კენტი რაოდენობის ელექტრონი გააჩნია;
- მოლეკულა იმყოფება ძირითად თუ აღვზნებულ მდგომარეობაში;
- მოლეკულას გახსნილი თუ შეკრული ელექტრონული სფერო გააჩნია.

### 7.16. მოდელის ელექტრონული კონფიგურაციის განსაზღვრა

MOPAC-ის გაანგარიშების შესრულების წინ შერჩეულ უნდა იქნას მოდელის ელექტრონული კონფიგურაცია. MOPAC-ს ესაჭიროება მოლეკულის რეზულტატური მუხტი, რათა განსაზღვრულ იქნას მოლეკულის ელექტრონული სფერო სად არის გახსნილი და სად შეკრული. თუ მოლეკულას გააჩნია რეზულტატური მუხტი, მაშინ იგი დამუხტული ნაწილაკია. მუხტის აღნიშვნა მოდელზე შესაძლებელია ტექსტური

ცხრილი 3. კავშირი სპინურ რიცხვსა და მულტიპლეტურობას შორის

| სპინი | გაუწყვილებელი ელექტრონების რაოდენობა | მულტიპლეტურობა |
|-------|--------------------------------------|----------------|
| 0     | 0                                    | სინგლეტი       |
| 1/2   | 1                                    | დუბლეტი        |
| 1     | 2                                    | ტრიპლეტი       |
| 1 1/2 | 3                                    | კვარტეტი       |
| 2     | 4                                    | კვინტეტი       |
| 2 1/2 | 5                                    | სექსტეტი       |

შეტანის მოწყობილობით – ერთ-ერთ ნახშირბადის ატომზე „+“ ნიშნის დაწერით იგი გარდაიქმნება კარბოკატიონად. MOPAC-ს ასეთი მეთოდით აგებული მოდელის „წაკითხვისა“ და გაანგარიშებებში გათვალისწინების საშუალება აქვს. მუხტის შეტანის მეორე, ალტერნატიული მეთოდია სპეციალური დამატებითი ბრძანების მიცემა. დამატებითი ბრძანების შეტანის ფანჯარაში აკრიფოთ ტექსტი CHARGE=n, სადაც n=-2, -1, +1,+2 და ა.შ. (უნდა გვახსოვდეს, რომ სპეციალური ბრძანების სიტყვების შეტანისას შეცდომის დაშვება არ შეიძლება. წინააღმდეგ შემთხვევაში მანქანა მას იგნორირებას გაუკეთებს.

მოყვანილი ცხრილი (ცხრილი 4) დაგვეხმარება დამატებითი ბრძანებების სწორად გამოყენებაში.

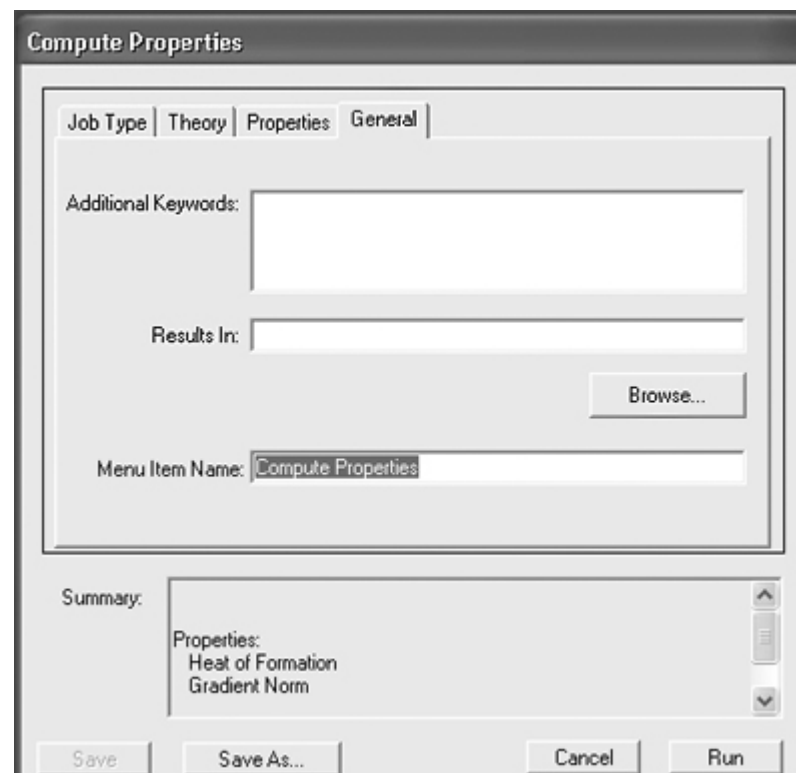
### 7.17. გადასართავი GENERAL (ზოგადი)

პროგრამა Chem3D ქვანტურ-მექანიკური გაანგარიშებისას იყენებს გარკვეულ პარამეტრებს, რომლებსაც მანქანა გაანგარიშებების შესრულებისას ითვალისწინებს. იმავედროულად, მომხმარებელს აქვს საშუალება აღნიშნული პარამეტრები ცვალოს სურვილისა და მიზნების მიხედვით. პარამეტრების ცვლილებისათვის საჭიროა სპეციალური დამატებითი ბრძანებების შეტანა, რისთვისაც გამოიყენება გადასართავი - **General (ზოგადი)** (იხ.ნახ. 77).

იგი შეიცავს სამ ტექსტურ ფანჯარას: **Additional Keyword** (დამატებითი ბრძანება), **Results In** (შედეგების მისამართი), **Menu Item Name** (მენიუს ოფციის დასახელება).

როგორც უკვე იყო აღნიშნული, დამატებითი ბრძანებების შეტანა არჩევითია, ანუ მათი არ არსებობის შემთხვევაში, მანქანა მაინც ახორციელებს გაანგარიშებას, რისთვისაც იყენებს ავტომატურ პარამეტრებს. ერთ-ერთი ასეთი პარამეტრია - ბრძანება **EF (Eigenvector Following - საკუთარი ვექტორების მიმდევრობა)**. იგი გეომეტრიული ოპტიმიზაციის ავტომატურ პარამეტრს წარმოადგენს. გეომეტრიული ოპტიმიზაცია შესაძლებელია განხორციელდეს **ბროიდენ-ფლეტჩერ-გოლდფარგ-შანოს** მეთოდით, რითვისაც დამატებითი ბრძანების ფანჯარაში უნდა ჩაიწეროს შემდეგი სპეციალური ბრძანება **BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)**.

დანართში B მოცემულია იმ დამატებითი ბრძანებების არასრული სია, რომლებიც შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას MOPAC-ის გაანგარიშებისას.



ნახ. 77. ზოგადი პარამეტრების შეტანის დიალოგის ფანჯარა (პროგრამა Chem3D)



### 7.18. ნაერთის ოპტიმიზაცია გარდამავალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში

მოდელის გარდამავალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში ოპტიმიზაცია ნიშნავს ისეთი კონფორმერის მოძიებას, რომელიც ყველაზე ახლოსაა გარდამავალ მდგომარეობასთან ანუ მისი ენერჯის შემცველობა პოტენციური ენერჯის ზედაპირზე არ უნდა შეესაბამებოდეს გლობალურ და ლოკალურ მინიმუმის წერტილებს.



გაანგარიშების შესრულება წარმოებს MOPAC-ის დიალოგის ფანჯრის გამოყენებით. გავააქტიურთ გადასართავი **Job Types** (დავალებების ტიპები) და ჩამოსაშლელი მენიუდან შევარჩიოთ დავალება **Optimize To Transition State** (ოპტიმიზაცია გარდამავალ მდგომარეობაში). სანამ გავააქტიურებთ ოპტიმიზაციის დაწყების ღილაკს **Run** (გაშვება), შეგვიძლია ნახევარემპირული მეთოდისა და ტალღური ფუნქციის სახის არჩევა. ამისათვის უნდა გავააქტიუროთ შესაბამისი გადამრთველები და მოვახდინოთ არჩევა. პარამეტრების შერჩევის დასრულების შემდეგ გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება). გაანგარიშების შედეგები მოთავსდება შეტყობინებების ფანჯარაში.

უმარტივესი მაგალითის სახით განვიხილოთ ეთანის ჩამოფარებული კონფორმერი. ჩვენს ამოცანას წარმოადგენს ავგოთ ეთანის მოლეკულა და მოვახდინოთ მისი ოპტიმიზაცია გარდამავალ მდგომარეობაში, რომელიც ჩამოფარებული კონფორმერის სახელით არის ცნობილი:

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **New Model** (ახალი მოდელი)
2. ავირჩიოთ ტექსტური აგების მოწყობილობა  მოწყობილობების პალიტრიდან.
3. შევიტანოთ ტექსტი **CH3CH3**. **Enter** ღილაკის დაჭერის შემდეგ ეკრანზე აიგება ეთანის მოლეკულა.
4. ავირჩიოთ მონიშვნის მოწყობილობა  მოწყობილობების პალიტრიდან
5. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაში თავისუფალ ადგილას, რათა მოიხსნას მონიშვნა.
6. **Tools** (მოწყობილობები) მენიუდან გავააქტიუროთ **Show Rotation Bars** (ბრუნვის ღილაკების ჩვენება)
7. მოვნიშნოთ **C1** ატომი
8. ორჯერ დავაწკაპუნოთ შინაგანი ბრუნვის მოწყობილობაზე (ნახ. 69) და შევიტანოთ მნიშვნელობა „57“. აიგება ჩამოფარებულ კონფორმერთან ძალიან მიახლოებული სტრუქტურა. მისი ჩამოფარებულ

- კონფორმერში სრული ოპტიმიზაციისათვის გავაგრძელოთ შემდეგი სახის გაანგარიშებები.
9. მოვნიშნოთ **C2** ატომი და **C1** და **C2** ატომებთან ბმული წყალბად ატომები, მაგალითად **H4** და **H7**. შედეგად გვექნება მონიშნული **H4-C1-C2-H7**.
  10. **Analyze** (ანალიზი) მენიუში მოვებნოთ ქვემენიუ **Show Measurements** (განზომილებების ჩვენება) და გავააქტიუროთ. ავირჩიოთ ბრძანება **Show Dihedral Angles** (დიჰედრალური კუთხის ჩვენება). ეკრანზე გამოჩნდება შეტყობინებების ცხრილი (ნახ. 78).
  11. მენიუდან **MOPAC** ავირჩიოთ **Optimize To Transition State** (ოპტიმიზაცია გარდამავალ მდგომარეობაში)
  12. ჩავრთოთ ბრძანება **Copy Measurements To Messages** (განზომილებების კოპირება შეტყობინების ფანჯარაში)
  13. დანარჩენი პარამეტრები დავტოვოთ უცვლელად
  14. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).  
ეთანის მოლეკულა ოპტიმიზირებული იქნება ჩამოფარებულ კონფორმერში. ამას ადასტურებს დიჰედრალური კუთხის მნიშვნელობა - იგი გაუტოლდება ნულს.  
ჩამოფარებული ეთანის კონფორმერის ნიუმერის პროექციის მიღებისათვის მოვნიშნოთ ორივე ნახშირბადატომი და გავააქტიუროთ ქვემენიუ **Move To** (გადაადგილე), რომელიც მოთავსებულია მენიუში **Object** (ობიექტი). ავირჩიოთ ბრძანება **Move To Z-Axis** (გადაადგილება Z-ღერძის მიმართ).

### 7.19. თვისებების ანგარიში

წერტილოვანი ენერჯის მნიშვნელობიდან შესაძლებელია სხვადასხვა თვისების გაანგარიშება, როგორცაა:

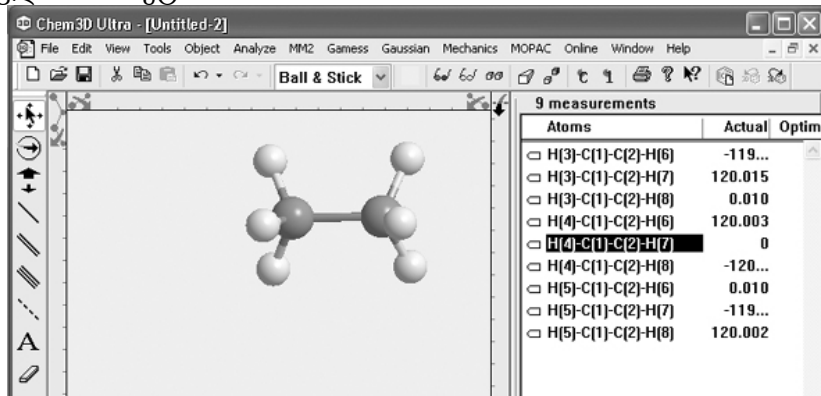
- ნაერთის წარმოქმნის სითბო;
- დიპოლური მომენტი;
- ატომების პირობითი მუხტები;
- სოლვატაცია წყლისა და სხვა გამხსნელების არეში;
- ელექტროსტატიკური პოტენციალი;
- მოლეკულური ზედაპირი;

- სპინური სიმკვრივე.
- ზეშეუღლების ეფექტის კონსტანტები

თვისებების გაანგარიშებისას შესაძლებელია როგორც ერთი ცალკეული თვისების, ისე რამოდენიმე თვისების ერთდროულად გაანგარიშება.

თვისებების ანაგირიშისათვის უნდა გავააქტიუროთ MOPAC მენიუ, ავირჩიოთ ბრძანება **Compute Properties** (თვისებების ანგარიში). დიალოგის ფანჯარაში, რომელიც მოიცავს თვისებების ჩამონათვალს, არჩევა წარმოებს თავუნას ღილაკის დაწკაპუნებით. ერთზე მეტი თვისების მონიშვნისას გამოიყენება Shift ღილაკის თავუნასთან კომბინაცია.

ახლა შედარებით დაწვრილებით განვიხილოთ თითოეული პარამეტრი.



ნახ. 78. მოდელის ფანჯარა და შეტყობინებების ცხრილი პროგრამა Chem3D-ში. ცხრილში მოცემულია დირედრალური კუთხის მნიშვნელობა აგებული ეთანის მოლეკულისათვის.

### 7.19.1. წარმოქმნის სითბო $\Delta H_f$

$\Delta H_f$  წარმოადგენს მიმდინარე კონფორმერის წარმოქმნის სითბოს რაოდენობას. იგი მნიშვნელოვან ინფორმაციას იძლევა კონფორმერების მდგრადობის ურთიერთშედარებისათვის. MOPAC ანგარიშობს სტანდარტული მდგომარეობის ელემენტებისაგან შედგენილი ნაერთის ერთი მოლი რაოდენობის წარმოქმნის ენერჯიას აირად ფაზაში. წარმოქმნის სითბო არის ადიტიური სიდიდე და წარმოადგენს შემდეგი კომპონენტების ჯამს.

$$\Delta H_f = E_{\text{ელექტ}} + E_{\text{ბირთ}} + E_{\text{იზოლ}} + E_{\text{ატომ}}$$

სადაც  $E_{\text{ელექტ}}$  იანგარიშება SCF\*-ის გაანგარიშებით,  $E_{\text{ბირთ}}$  ბირთვებს შორის განზიდვის ენერჯია,  $E_{\text{იზოლ}}$ ,  $E_{\text{ატომ}}$  პარამეტრები მიღებულია ელემენტების პოტენციალური ფუნქციიდან.

გაანგარიშების შემდეგ შეტყობინების ფანჯარაში მხოლოდ ჯამური სითბოს რაოდენობა ჩანს. თუ გვინტერესებს ცალკეული კომპონენტების მნიშვნელობის სიდიდეებიც, მაშინ უნდა ვიხმაროთ დამატებითი ბრძანება ENPART. ეს უკანასკნელი  $\Delta H_f$  ენერჯიის შემადგენელი კომპონენტების მნიშვნელობების ანგარიშის შედეგებს აგზავნის ფაილში \*.out.

### 7.19.2. დიპოლური მომენტი

დიპოლური მომენტი ენერჯიის პირველი რიგის წარმოებულია მოდებული ელექტრული ველის მიმართ. იგი ახასიათებს მოლეკულის მუხტის არასიმეტრიულობას და აღიწერება სამი მიმართულების ვექტორებით.

დიპოლური მომენტის მნიშვნელობის ანგარიშისას უნდა გვახსოვდეს, რომ განსხვავებული მნიშვნელობები მიიღება მულიკენის, ვანგ-ფორდის მუხტებისა და ელექტროსტატი-

\* Self-Consistent Field მეთოდი არის შრედინგერის განტოლების ამოხსნის რიცხვითი მიახლოების ალგორითმი, რომელიც გამოიყენება ძირითად მდგომარეობაში არსებული მოლეკულებისათვის.

კური პოტენციალების მეთოდებისას, ვინაიდან თითოეული იყენებს სიმკვრივის განსხვავებულ მატრიცას.

მაგალითისთვის ვიანგარიშით ფორმალდეჰიდის დიპოლური მომენტი:

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (ახალი მოდელი);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;
4. შევიტანოთ ტექსტი „H2CO“. აიგება ფორმალდეჰიდის მოლეკულა;
5. MOPAC მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯის მინიმიზაცია). გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდად ავირჩიოთ AM1 მეთოდი;
6. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Dipole** (დიპოლი);
7. გავააქტიუროთ ლილაკი **Run** (გაშვება).

შეტყობინების ფანჯარაში მივიღებთ ცხრილს, რომელიც აღწერს ელექტრონების განაწილებას.

|                         | x      | y     | z      | სრული |
|-------------------------|--------|-------|--------|-------|
| დიპოლი (ვექტორი), დებაი | -2.317 | 0.000 | -0.000 | 2.313 |

აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ თუ ჩვენ შემოვაბრუნებთ მოლეკულას ეკრანზე, მაშინ x, y, z-ის მნიშვნელობები შეიცვლება, თუმცა სრული დიპოლური მომენტის მნიშვნელობა უცვლელი დარჩება.

### 7.19.3. მუხტები

მუხტის სიდიდეების ანგარიში წარმოებს სხვადასხვა მეთოდით. ცნობილია ვანგ-ფორდის ელექტროსტატიკური პოტენციალი, მულიკენის მუხტები და ელექტროსტატიკური პოტენციალები.

ვანგ-ფორდის მეთოდი საუკეთესო შედეგს ნაერთის ქიმიურ მდგრადობაზე იძლევა, მულიკენის მეთოდი კი ადგენს მუხტების განაწილების სურათსა და სიმკვრივის მატრიცას. მულიკენის მეთოდის შერჩევასა შესაძლებელია შემდეგი დამატებითი ბრძანებების გამოყენება: MYLLIK, GEO-OK, MMOK (იხ. დანართი B).

ელექტროსტატიკური პოტენციალებით გამოთვლილი მუხტის სიდიდეები საუკეთესო შედეგს იძლევა ნაერთის რეაქციისუნარიანობაზე. ელექტროსტატიკური პოტენციალების ანგარიშისათვის ღვება ელექტროსტატიკურ პოტენციალთა ბაღე.

ელექტროსტატიკური პოტენციალების საშუალებით მუხტის სიდიდეების ანგარიშისას შეიძლება გამოყენებულ იქნას შემდეგი დამატებითი ბრძანებები: PMEP, QPMEP, GEO-OK, MMOK, ESP, POTWET (იხ. დანართი B).

განვიხილოთ რამოდენიმე მაგალითი:

მაგალითი 1. შევადაროთ ერთმანეთს ქლორმეთილებისა და მეთილის კატიონების მდგრადობა.

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (ახალი მოდელი);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;
4. შევიტანოთ ტექსტი „CCl3“. აიგება ტრიქლორმეთილის ფრაგმენტი;
5. ანალოგიურად ავაგოთ დიქლორმეთილის (CHCl<sub>2</sub>), მონოქლორმეთილის (CH<sub>2</sub>Cl) და მეთილის (CH<sub>3</sub>) კატიონები. შევნიშნავთ, რომ ოთხივე კატიონი არის წყვილ ელექტრონიანი შეკრული სფეროს მქონე სისტემა და განთავსებულია სინგლეტურ ძირითად მდგომარეობაზე. ამდენად, არანაირი დამატებითი ბრძანების შეტანა არ არის საჭირო. ანგარიშისათვის გამოიყენება RHF ტალღური ფუნქცია;
6. თითოეული ფრაგმენტის კატიონის სახით ჩაწერი-სათვის კურსორი მივიყვანოთ ცენტრალურ ნახშირ-ბადატომზე და დავაწკაპუნოთ. კლავიატურიდან შევიტანოთ „+“ ნიშანი;

7. MOPAC მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (*ენერჯის მინიმიზაცია*). გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარ-ემპირიულ მეთოდს ავირჩიოთ AM1 მეთოდი;
8. გადასართავიდან **Property** (*თვისებები*) ავირჩიოთ **Charges** (*მუხტები*);
9. მუხტების ნუსხაში ავირჩიოთ Wang-Ford-ის მეთოდი;
10. გავააქტიუროთ ლილაკი **Run** (*გაშვება*).

ანგარიშის შედეგები ჩაიწერება შეტყობინების ფანჯარაში. ანგარიშის დასრულების შემდეგ, კერძოდ ენერჯის მინიმიზაციის შედეგად, სტრუქტურები მიიღებენ ბრტყელ სახეს, რადგან ნახშირბად ატომი  $sp^2$  ჰიბრიდულ მდგომარეობაში იმყოფება.

ანგარიშის შედეგებს ექნება შემდეგი სახე:

| $CCl_3^+$ |         | $CHCl_2^+$ |         | $CH_2Cl^+$ |         | $CH_3^+$ |         |
|-----------|---------|------------|---------|------------|---------|----------|---------|
| C(1)      | 0.03660 | C(1)       | 0.11255 | C(1)       | 0.32463 | C(1)     | 0.72465 |
| Cl(2)     | 0.31828 | Cl(2)      | 0.33189 | Cl(2)      | 0.35852 | H(2)     | 0.08722 |
| Cl(3)     | 0.32260 | Cl(3)      | 0.33171 | H(3)       | 0.15844 | H(3)     | 0.09406 |
| Cl(4)     | 0.32253 | H(4)       | 0.22384 | H(4)       | 0.15841 | H(4)     | 0.09406 |

ამ უმარტივესი გაანგარიშებიდან ჩანს, რომ მუხტი არ არის ლოკალიზებული ცენტრალურ ნახშირბადის ატომზე, არამედ იგი გავრცელებულია ქლორის ატომისაკენ. ამდენად, ქლორატომების რაოდენობის შემცირებით მცირდება კატიონის მდგრადობაც.

**მაგალითი 2.** განვიხილოთ მონოხანაცვლებული ფენოქსიდ იონებში მუხტის განაწილების სურათი. ამისათვის გამოვიყენოთ მულიკენის ანგარიშის მეთოდი.

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (*ახალი მოდელი*);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;

4. შევიტანოთ ტექსტი „PhO-“. აიგება ფენოქსიდის იონის ფრაგმენტი. იგი არის წყვილ ელექტრონიანი შეკრული სფეროს მქონე სისტემა და განთავსებულია სინგლურ დირითად მდგომარეობაზე. ამდენად, არანაირი დამატებითი ბრძანების შეტანა არ არის საჭირო. ანგარიშისათვის გამოვიყენებ RHF ტალღური ფუნქცია;
5. MOPAC მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (*ენერჯის მინიმიზაცია*);
6. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარ-ემპირიულ მეთოდს ავირჩიოთ PM3 მეთოდი. ეს უკანასკნელი მუხტების ნუსხიდან ავტომატურად შეირჩევს მულიკენის მეთოდს;
7. გადასართავიდან **Property** (*თვისებები*) ავირჩიოთ **Charges** (*მუხტები*);
8. გავააქტიუროთ ლილაკი **Run** (*გაშვება*).

ანალოგიურად განვახორციელოთ ანგარიში პარა-, მეტა- და ორთო-ნიტროფენოქსიდანიონებზე. მათი აგებისათვის კურსორი მივიყვანოთ შესაბამის წყალბადის ატომზე და დავაწკაპუნოთ თავუნას ლილაკზე. გამოსულ ტექსტურ ფანჯარაში ჩავწეროთ „NO2“.

ანგარიშის შედეგები შეჯამებული სახით მოცემულია ქვემოთ მოყვანილი ცხრილის სახით (ცხრილი 5).

შედეგებიდან ჩანს, რომ ნიტროჯგუფების ჩანაცვლება ამცირებს უარყოფითი მუხტის სიდიდეს შემდეგი მწკრივის მიხედვით მეტა > პარა > ორთო და ამდენად, ყველაზე მეტად სტაბილიზირებული არის ორთო იზომერი.

ცხრილი 5. მუხტის განაწილება ფენოსქილსა და ნიტროფენოქსიდებში

| ფენოქსიდი   | ნიტროფენოქსიდი |              |              |
|-------------|----------------|--------------|--------------|
|             | პარა-ნიტრო-    | მეტა-ნიტრო-  | ორთო-ნიტრო-  |
| C1 0.39572  | C1 0.41546     | C1 0.3077    | C1 0.45789   |
| C2 -0.46113 | C2 -0.44929    | C2 -0.36594  | C2 -0.75764  |
| C3 -0.09388 | C3 -0.00519    | C3 -0.33658  | C3 0.00316   |
| C4 -0.44560 | C4 -0.71261    | C4 -0.35950  | C4 -0.41505  |
| C5 -0.09385 | C5 -0.00521    | C5 -0.10939  | C5 -0.09544  |
| C6 -0.46109 | C6 -0.44926    | C6 -0.41451  | C6 -0.38967  |
| O7 -0.57746 | O7 -0.4921     | O7 -0.54186  | O7 0.48265   |
| H8 0.16946  | H8 0.18718     | H8 0.21051   | N8 1.38805   |
| H9 0.12069  | H9 0.17553     | N9 1.31296   | H9 0.16911   |
| H10 0.15700 | N10 1.38043    | H10 0.19979  | H10 0.17281  |
| H11 0.12067 | H11 0.17561    | H11 0.14096  | H11 0.13932  |
| H12 0.16946 | H12 0.18715    | H12 0.17948  | H12 0.18090  |
|             | O13 -0.70347   | O13 -0.65265 | O13 -0.71656 |
|             | O14 -0.70345   | O14 -0.64406 | O14 -0.65424 |

## 7.20. პოლარიზებულობა

პოლარიზებულობა (და აგრეთვე ჰიპერპოლარიზებულობა) მოდებული ელექტრული ველის საფუძველზე იძლევა ინფორმაციას ელექტრონების გავრცელებაზე (განაწილებაზე). როგორც წესი, მოლეკულები, რომლებიც შეიცავენ ძლიერ დელოკალიზებულ ბმებს, ხასიათდებიან პოლარიზებულობის მაღალი მნიშვნელობით.

პოლარიზებულობა შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას ისეთი რეაქციების დასახასიათებლად, რომლის დროსაც მოლეკულების ოპტიკური თვისებები იცვლება.

პოლარიზებულობა და ჰიპერპოლარიზებულობა გამოისახება პირველი რიგის ( $\alpha$ ) -xx, yy, zz, xz, yz, xy ტენზორებით. მათი ანგარიში შესაძლებელია MINDO/3 ნახევარ-ემპირიული მეთოდით.

განვიხილოთ მაგალითი მ-ნიტროტოლუოლზე.

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (ახალი მოდელი);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;
4. შევიტანოთ ტექსტი „PhCH3“. აიგება ტოლუოლის მოლეკულა;
5. ავირჩიოთ ბრძანება **Show** (ჩვენება), რომელიც არის მოთავსებული **Object** (ობიექტი) მენიუს **Show Serial Nibmers** (ატომების ნუმერაციის ჩვენება) ქვემენიუში;
6. ტექსტური შეტანის მოწყობილობით დავაწკაპუნოთ H(9) ატომზე და ტექსტის შეტანის ფანჯარაში შევიტანოთ „NO2“. ტოლუოლის მოლეკულიდან მიიღება პ-ნიტროტოლუოლი;
7. **MOPAC** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯის მინიმიზაცია);
8. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდს ავირჩიოთ AM1 მეთოდი. ეს უკანასკნელი მუხტების ნუსხიდან ავტომატურად შეირჩევს მულიკენის მეთოდს;
9. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Polarizabilities** (პოლარიზებულობა);
10. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).

ქვემოთ მოცემულ ცხრილში მოყვანილია ანგარიშის შედეგები. ისინი უჩვენებენ მოდებული ელექტრული ველის გავლენას პირველი რიგის პოლარიზებულობაზე.

| მოდებული ველი, კვ | ალფა xx   | ალფა yy  | ალფა zz  |
|-------------------|-----------|----------|----------|
| 0.000000          | 108.23400 | 97.70127 | 18.82380 |
| 0.250000          | 108.40480 | 97.82726 | 18.83561 |
| 0.500000          | 108.91847 | 98.20891 | 18.86943 |

პოლარიზებულობის ანგარიშის დროს შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას შემდეგი სახის დამატებითი ბრძანებები: POLAR (E=n), GEO-OK, MMOK.

## 7.21. სოლვატაცია წყალში

მეთოდი COSMO გამოიყენება გამხსნელის გარემოცვაში მყოფი ნაწილაკების მდგრადობის შესწავლისათვის. გამხსნელად ავტომატურად აიღება წყალი. COSMO მეთოდთან ერთად არსებობს აგრეთვე MST (Miertus-Sciricco-Tomasi) სოლვატაციის მოდელი, რომელიც მოდელს აგებს მხოლოდ წყლის არეში. MOPAC-ის მიერ რომ შესრულდეს უკანასკნელი მეთოდით გაანგარიშება, საჭიროა გამოვიყენოთ დამატებითი ბრძანება MST.

COSMO მეთოდით გაანგარიშებების შესრულებისას გამოყენებადი დამატებითი ბრძანებებია EPS=n,nn, GOE-OK, MMOK.

მაგალითის სახით შევისწავლოთ გლიცინის ცვიტერიონის მდგრადობა წყლის არესა და აირად ფაზაში.

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (ახალი მოდელი);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;
4. შევიტანოთ ტექსტი „HGlyOH“. აიგება გლიცინის მოდელი;
5. **MOPAC** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯიის მინიმიზაცია);
6. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდათ ავირჩიოთ PM3 მეთოდი. ეს უკანასკნელი მუხტების ნუსხიდან ავტომატურად შეირჩევს მულიკენის მეთოდს;

7. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Heat of Formation** (წარმოქმნის სითბო) და **COSMO Solvation** (სოლვატაცია);
8. გავააქტიუროთ ლილაკი Run (გაშვება).

ანგარიშის შედეგები მოთავსდება შეტყობინებების ფანჯარაში.

ახლა განვახორციელოთ ენერჯიის მინიმიზაცია სოლვატაციის ეფექტის გათვალისწინების გარეშე. ამისათვის თვისებების ნუსხიდან მონიშვნა გავაუქმეთ **COSMO Solvation in Water** (სოლვატაცია წყალში). შემდეგ გლიცინის მოდელი ავაგოთ ცვიტერიონის სახით:

1. აზოტის ატომზე მივიყვანოთ კურსორი, და ტექსტური შეტანის მოწყობილობით ჩავწეროთ ნიშანი „+“;
2. ანალოგურად მოვიქცეთ ჟანგბადის ატომისათვის და მივანიჭოთ უარყოფითი მუხტი (ტექსტის შეტანის მოწყობილობით ჩავწეროთ ნიშანი „-“);
3. განვახორციელოთ მინიმიზაციის პროცესი.

ორივე მიღებული შედეგი შეჯერებისათვის ერთად არის ქვემოთ მოყვანილი.

| გლიცინის ფორმა                | $\Delta H$<br>კკალ/მოლი | გამხსნელისათვის<br>მისაწვდომი ზედაპირი<br>$\text{Å}^2$ |
|-------------------------------|-------------------------|--|
| ნეიტრალური (H <sub>2</sub> O) | -108.32861              | 52.36067   |
| ცვიტერიონი (H <sub>2</sub> O) | -126.93974              | 52.37133   |
| ნეიტრალური (აირი)             | -92.75386               |  |
| ცვიტერიონი (აირი)             | -57.83940               |  |

## 7.22. ზემოთაღწერის ეფექტები

ზემოთაღწერის კონსტანტების განსაზღვრა იძლევა ელექტრონული სპინური რეზონანსის სპექტრის სიმულაციას. ეს სპექტრში რთული გახლეჩილი სიგნალების წარმოშობა გამოწვეულია გაუწყვილებელი ელექტრონების ურთიერთქმედებით ცენტრალურ პროტონთან.

ეს სპექტრომეტრია განსაზღვრავს ძლიერ მაგნიტურ ველში მოთავსებული ნაერთის გაუწყვილებელი ელექტრონების მიერ მიკროტალღური გამოსხივების შთანთქმას.

გაუწყვილებელი ელექტრონი შეიძლება ჰქონდეს შემდეგ ნაწილაკებს:

- თავისუფალ რადიკალებს
- კენტი ელექტრონების შემცველ მოლეკულებს
- გარდამავალი მეტალების კომპლექსებს
- იშვიათ მეტალთა იონებს
- ტრიპლეტური მდგომარეობის მოლეკულებს

ზემოთაღწერის კონსტანტების გაანგარიშებისას შესაძლებელია შემდეგი დამატებითი ბრძანებების გამოყენება: UHF, Hyperfine, GEO-OK, MMOK (იხ. დანართი B).

მაგალითის სახით განვიხილოთ ეთილის რადიკალის ზემოთაღწერის კონსტანტების გამოთვლა.

1. **File** მენიუდან ავირჩიოთ **New Model** (ახალი მოდელი);
2. ავირჩიოთ ტექსტის შეტანის მოწყობილობა;
3. დავაწკაპუნოთ მოდელის ფანჯარაზე. გამოჩნდება ტექსტის შეტანის ფანჯარა;
4. შევიტანოთ ტექსტი „EtH“. აიგება ეთილის რადიკალის მოდელი;
5. ავირჩიოთ მონიშვნის მოწყობილობა;
6. მოვნიშნოთ H(8) ატომი;
7. კლავიატურაზე დავაწვეთ Del ღილაკს (შესაძლებელია ღილაკის „←“ Backspace გამოყენებაც). თუ ჩართულია რეჟიმი, რომელიც ავტომატურად ასწორებს ვალენტობას ელემენტზე წყალბადების

დაკავშირებთ, მაშინ პროგრამა შეგვეკითხება აღნიშნული რეჟიმის გამორთვის ნებართვის შესახებ. ეკრანზე გამოსულ შეტყობინებას Turn Off Automatic Restrification (ვალენტობის ავტომატური კორექციის გამორთვა) დავეთანხმებით.

8. MOPAC მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯის მინიმიზაცია);
9. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდთან ავირჩიოთ PM3 მეთოდი;
10. ტალღური ფუნქცია ავირჩიოთ ღია სფეროსთვის **Open Shell (Unrestricted)** (ღია სფერო-შეუზღუდავი);
11. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Hyperfine Coupling Constants** (ზემოთაღწერის კონსტანტები);
12. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).

მიღებული ზემოთაღწერის კონსტანტების მნიშვნელობები იქნება:

- C1 0.02376
- C2 -0.00504
- H3 -0.02632
- H4 -0.02605
- H5 0.00350
- H6 0.05672
- H7 0.05479

მიღებული მონაცემებიდან შეიძლება დავასკვნათ, რომ ეთილის რადიკალში გაუწყვილებელი ელექტრონი არის დელოკალიზებული. წინააღმდეგ შემთხვევაში ზემოთაღწერის კონსტანტები ნულის ტოლი იქნებოდა.

## 7.23. სპინური სიმკვრივე

მოლეკულური სპინური სიმკვრივე თავს იჩენს იმ შემთხვევაში, როდესაც იგი მოიცავს გაუწყვილებელ

ელექტრონებს. სპინური სიმკვრივის გაანგარიშების მონაცემები მოდელის მოცემული მდგომარეობის  $\alpha$ -ელექტრონების ფარდობით რაოდენობის დათვლის საშუალებას იძლევა. სპინური სიმკვრივის გაანგარიშებით ასევე შესაძლებელია ესრ სპექტრის სიმულაცია. მისი ანგარიში ხორციელდება ორი მეთოდით: RHF სპინური სიმკვრივისა და UHF სპინური სიმკვრივის მიხედვით.

UHF სპინური სიმკვრივის ანგარიშისას ცალკე-ცალკე განიხილება  $\alpha$  და  $\beta$ -ელექტრონები, RHF მეთოდი კი იყენებს  $1/2$  ელექტრონის კორექციას. უკანასკნელ მეთოდს ძირითადად მიმართავენ მცირე ზომის მოლეკულებისათვის, ვინაიდან ამ დროს გაანგარიშების სიჩქარე მნიშვნელოვნად დიდია, ვიდრე პირველი მეთოდისას.

სპინური სიმკვრივის ანგარიშისას შესაძლებელია შემდეგი დამატებითი ბრძანებების გამოყენება: UHF, GEO-OK, MMOK, SPIN, ESR.

**მაგალითი 1.** ეთილის რადიკალის UHF სპინური სიმკვრივის გაანგარიშება:

1. ავაგოთ ეთილის რადიკალი წინა მაგალითის ანალოგიურად;
2. **MOPAC** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯის მინიმიზაცია);
3. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდად ავირჩიოთ PM3 მეთოდი;
4. ტალღური ფუნქცია ავირჩიოთ ღია სფეროსთვის **Open Shell (Unrestricted)** (ღია სფერო - შეუზღუდავი);
5. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Spin Density** (სპინური სიმკვრივე);
6. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).

ანგარიშის შედეგები მოთავსდება შეტყობინების ფანჯარაში.

|          |                   |
|----------|-------------------|
| 0.07127  | C1 s              |
| 0.06739  | C1 p <sub>x</sub> |
| 0.08375  | C1 p <sub>y</sub> |
| 0.94768  | C1 p <sub>z</sub> |
| -0.01511 | C2 S              |
| -0.06345 | C2 p <sub>x</sub> |
| -0.01844 | C2 p <sub>y</sub> |
| -0.03463 | C2 p <sub>z</sub> |
| -0.07896 | H3 s              |
| 0.07815  | H4 s              |
| 0.01046  | H5 s              |
| 0.05488  | H6 s              |
| 0.05329  | H7 s              |

შედეგებიდან ჩანს, რომ გაუწყვილებელი ელექტრონი უფრო მეტად ლოკალიზებული არის C<sub>1</sub> ატომის z ორბიტალზე, რაც მიუთითებს ამ ნახშირბადატომის მაღალ რეაქციისუნარიანობაზე.

**მაგალითი 2.** ეთილის რადიკალის RHF სპინური სიმკვრივის გაანგარიშება:

1. ავაგოთ ეთილის რადიკალი წინა მაგალითის ანალოგიურად;
2. **MOPAC** მენიუდან ავირჩიოთ ბრძანება **Minimize Energy** (ენერჯის მინიმიზაცია);
3. გრადიენტის მნიშვნელობა დავტოვოთ 0.1, ხოლო ნახევარემპირიულ მეთოდად ავირჩიოთ PM3 მეთოდი;
4. ტალღური ფუნქცია ავირჩიოთ ღია სფეროსთვის **Close Shell (Restricted)** (შეკრული სფერო - შეუზღუდული);
5. გადასართავიდან **Property** (თვისებები) ავირჩიოთ **Spin Density** (სპინური სიმკვრივე);
6. გავააქტიუროთ ღილაკი **Run** (გაშვება).

ანგარიშის შედეგები მოთავსდება შეტყობინების ცხრილში და ატომის თავზე გვიჩვენებს ჯამურ სპინურ სიმკვრივეს.



0.90744 C1  
0.00644 C2  
0.00000 H3  
0.00000 H4  
0.00001 H5  
0.04395 H6  
0.04216 H7

შედეგებიდან ჩანს, რომ გაუწყვილებელი ელექტრონი უფრო მეტად ლოკალიზებულია  $C_1$  ატომზე.

## დანართი A

| მეთოდის ტიპი  | დადებითი მხარე  | ურყოფითი მხარე   | საუკეთესო შემდეგი სისტემებისათვის  |
|---|---|--|--|
| <p><b>მოლეკულური მექანიკა</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ იყენებს კლასიკური ფიზიკის კანონებს</li> <li>▪ დაფუძნებულია ძალურ ველზე ემპირიულ პარამეტრებთან ერთად</li> </ul>                         | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ ყველაზე სუსტი, მაგრამ ყველაზე სწრაფი გაანგარიშების საშუალება. განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია სუსტი სიმძლავრის მანქანებისათვის</li> <li>▪ შესაძლებელია გამოყენებული იქნას ისეთი დიდი მოლეკულებისათვის, როგორცაა ენზიმები</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ პრაქტიკული ძალურ ველი გამოიყენება მხოლოდ მოლეკულების შეზღუდული კლასისათვის</li> <li>▪ არ ანგარიშობს ელექტრონულ თვისებებს</li> <li>▪ ესაჭიროება ექსპერიმენტული მონაცემები</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ დიდი სისტემებისათვის (ათასობით ატომისათვის)</li> <li>▪ სისტემებისათვის და პროცესებისათვის, რომლის დროსაც ადგილი არა აქვს ბმების გახლეჩას ან წარმოქმნას</li> </ul> |
| <p><b>ნახევარემპირიული</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ იყენებს ქვანტური ფიზიკის კანონებს</li> <li>▪ აჯამებს ექსპერიმენტით მიღებულ ემპირიულ პარამეტრებს</li> <li>▪ იყენებს მიახლოებებს</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ მოითხოვს ab initio მეთოდზე ნაკლებ რესურსებს</li> <li>▪ ანგარიშობს გარდამავალ და ალგზნებულ მდგომარეობებს</li> </ul>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ ესაჭიროება ექსპერიმენტული მონაცემები</li> <li>▪ ხასიათდება ნაკლები სიზუსტით, ვიდრე ab initio მეთოდი</li> </ul>  | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ საშუალო სისტემებისათვის (ასობით ატომისათვის)</li> <li>▪ სისტემებისათვის, რომელთათვისაც დამახასიათებელია ელექტრონული გადასვლები</li> </ul>                         |

| მეთოდის ტიპი   | დადებითი მხარე  | ურყოფითი მხარე   | საუკეთესო შემდეგი სისტემებისათვის  |
|--|---|--|--|
| <p><b>ab initio</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ იყენებს ქვანტური ფიზიკის კანონებს</li> <li>▪ აღიწერება წმინდა მათემატიკური საშუალებებით და არ ცნობს ემპირიულ პარამეტრებს</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ გამოსადეგია სიტემების ფართო სპექტრისათვის</li> <li>▪ არ არის დამოკიდებული ექსპერიმენტულ მონაცემებზე</li> <li>▪ ანგარიშობს გარდამავალ და ალგზნებულ მდგომარეობებს</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ მოითხოვს აპარატურის დიდ სიმძლავრეებს და ანგარიშის დიდ დროს</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ პატარა სისტემებისათვის (ათეულობით ატომი)</li> <li>▪ სისტემებისათვის, რომელთათვისაც დამახასიათებელია ელექტრონული გადასვლები</li> <li>▪ მოლეკულებისათვის ან სისტემებისათვის, რომელთათვისაც არ არის ცნობილი ექსპერიმენტული მონაცემები</li> <li>▪ სისტემებისათვის, რომელნიც მოითხოვენ დიდ სიზუსტეს</li> </ul> |

## დანართი B

### CS MOPAC-ში გამოყენებული დამატებითი ბრძანებები

| ბრძანება                                   | მნიშვნელობა   |
|--|---|
| EF<br>(Eigenvector Following)              | საკუთარი ვექტორის მინიმუმზაციის რეჟიმი  |
| BFGS<br>(Broyder-Fletcher-Goldfarb-Shanno) | ბროუდენ-ფლეჩერ-გოლბფარბ-შანოს გეომეტრიული ოპტიმიზაციის რეჟიმი   |
| GEO-OK                                     | Z-მატრიცის ზედღების შემოწმება   |
| MMOK                                       | მოლეკულური მექანიკის გაანგარიშებისას ამილური ბმებისათვის შეაქვს შესაბამისი კორექტირება. აღნიშნული რეჟიმის გამოერთვისათვის გამოიყენება ბრძანება NOMM       |
| RMAX=n.nn                                  | ენერჯის მნიშვნელობის ანგარიშისას ცვლილებები ნაკლები უნდა იყოს n.nn მნიშვნელობაზე. აღნიშნული ბრძანების გამოყენების გარეშე ავტომატური მნიშვნელობა არის 4.00 |
| RMIN=n.nn                                  | ენერჯის მნიშვნელობის ანგარიშისას ცვლილებები მეტი უნდა იყოს n.nn მნიშვნელობაზე. აღნიშნული ბრძანების გამოყენების გარეშე ავტომატური მნიშვნელობა არის 0.00    |
| PRECISE                                    | ახორციელებს SCF გაანგარიშებას, რომელიც იყენებს უმაღლეს მიახლოებას და მნიშვნელობები არ განიცდიან ფლუქტუაციას რამოდენიმე გაშვებისას                         |
| CET  | უგულველყოფს მნიშვნელობების შემოწმებას, რის გამოც გაანგარიშება წარმოებს უფრო სწრაფად   |
| RECALC=5                                   | იგი გამოიყენება, თუ ოპტიმიზაცია მოიცავს საეჭვო გარდაქმნას გარდავამალ მდგომარეობაში  |

| ბრძანება  | მნიშვნელობა   |
|-----------|---|
| ENPART    | *.out ფაილში იგ ზავნება წარმოქმნის სითბოს შემადგენელი ცალკეული კომპონენტების მნიშვნელობები  |
| MULLIK    | მუხტის სიდიდების ანგარიში წარმოებს მულიკენის პოპულაციის ანალიზის მეტოლით  |
| PMEP      | უზრუნველყოფს წერტილოვანი მუხტების სიდიდების გენერაციას  |
| QPMEP     | უზრუნველყოფს ვანგ-ფორდის ელექტროსტატიკური პოტენციალების რეჟიმის გააქტიურებას  |
| ESP       | უზრუნველყოფს ელექტროსტატიკური პოტენციალების რეჟიმის გააქტიურებას  |
| POTWRT    | უზრუნველყოფს ელექტროსტატიკური პოტენციალების ბადის ბეჭდვას   |
| UHF       | უზრუნველყოფს ჰარტრი-ფოკის მეტოლით ღია სფეროს ტალღური ფუნქციის ანგარიშს  |
| Hyperfine | უზრუნველყოფს ზემუდლების კონსტანტების ანგარიშის რეჟიმის გამოძახებას  |
| SPIN      | *.out ფაილში იგ ზავნება სპინური სიმკვრივის მატრიცა  |
| ESR       | უზრუნველყოფს RHF გაანგარიშების რეჟიმის ჩართვას  |
| DFORCE    | ნულოვანი წერტილის ენერჯია, რხევითი ენერჯია  |
| LOCALIZE  | ლოკალიზებული ორბიტალების დაბეჭდვა   |
| VECTORES  | მოლეკულური ორბიტალების კოეფიციენტების დაბეჭდვა  |
| BONDS     | ბმის სიგრძეების მატრიცა   |
| CIS       | უი შთანთქმის ენერჯიები, ახორციელებს პირველი ადგ ზნებული მდგომარეობის გაანგარიშებას. ბრძანება MECI-ის გამოყენების შემთხვევაში ინფორმაცია იგ ზავნება *.out ფაილში |
| FORCE     | ნულოვანი წერტილის ენერჯიისა და ნორმალური რხევითი სახეების ანგარიში. ბრძანების DFORCE-ს გამოყენების შემთხვევაში მონაცემები იგ ზავნება *.out ფაილში               |
| PI        | სიმკვრივის მატრიცის ამოხსნა $\sigma$ და $\pi$ ბმებს შორის   |

| ბრძანება   | მნიშვნელობა  |
|------------|--|
| PRECISION  | SCF კრიტერიუმს ზრდის 100-ჯერ. იგი გამოიყენება ენერჯის ანგარიშისას მიღებული მონაცემების სიზუსტის გაზრდისათვის |
| T-n[M,H,D] | ზრდის კომპიუტერის ანგარიშის დროს. ანგარიშის დრო ავტომატურად არის 1 სთ.                                       |

## დანართი C

### \*.OUT ფაილის გამოყენება

MOPAC-ის ანგარიშის შედეგების მიღება შესაძლებელია Chem 3D-ს შეტყობინებების ფანჯრის გამოყენებით, მაგრამ მასში ანგარიშის შედეგების გაგზავნისათვის გაანგარიშების დაწყების წინ უნდა იქნას ჩართული სპეციალური ჩამრთველი. მიუხედავად ამისა, შეტყობინებების ფანჯარაში გაანგარიშების ყველა შედეგი არ ხვდება. ასეთ შემთხვევაში შედეგების გამოსატანად გამოიყენება გარეგანი ფაილი, რომლის გაფართოვებაც არის \*.out და \*.aax. აღნიშნული ფაილების შექმნა წარმოებს ავტომატურად პროგრამის გაშვებისას. მათი მდებარეობის სრული ბილიკია c:\windows\temp\csmopac\output.

MOPAC-ის ყოველი ახალი გაშვება აღნიშნულ კატალოგში ხსნის ახალ ფაილს a\*.out (ვარსკვლავით აღნიშნული სიმბოლო არის რაიმე შემთხვევითი სიმბოლო, რომელსაც მანქანა თვითონ გამოიმუშავებს). \*.out ფაილში გაანგარიშების შედეგების განთავსებისათვის საჭიროა გაანგარიშებისას სპეციალური დამატებითი ბრძანებების გამოყენება (იხ. დანართი B). \*.out ფაილთან ერთად იქმნება შედეგების შეჯამების ფაილი \*.aax. MOPAC-ის ყოველი ახალი გაშვებისას x სიმბოლო იცვლება a-დან z-მდე (მაგალითად, \*.aaa, \*.aab, ... , \*.aaz). \*.out ფაილი კი MOPAC-ის ყოველი ახალი გაშვებისას ხელახლა იხსნება, ანუ აღდგენილი აქვს ძველი ინფორმაციის წაშლასა და ახლის ჩაწერას.

\*.aax ფაილში ინახება შემდეგი სახის ინფორმაცია:

- ელექტრონული ენერჯია
- ბირთვი-ბირთვი განზიდვა
- სიმეტრია
- იონიზაციის პოტენციალი

- HOMO და LUMO ენერგიები

\*.out ფაილში ინახება შემდეგი სახის ინფორმაცია:

- საწყისი ატომური კოორდინატები
- საწყისი Z-მატრიცა
- მოლეკულური ორბიტალების ენერგიები
- საბოლოო ატომური კოორდინატები

## ანბანური საკიბელი

|  |  |
|--|--|
| <p><b>ა</b></p> <p>ალინგერი, 115<br/>                 ატომური მასა, 11, 13, 15<br/>                 ატომური მოცულობა, 11<br/>                 ატომური რადიუსი, 11</p>  | <p>ელექტროსტატიკური ენერგია, 116, 117<br/>                 ელექტროუარყოფითობა, 11, 13, 15</p>  |
| <p><b>ბ</b></p> <p>ბრენსტედი, 26<br/>                 ბროიდენი, 142</p>  | <p><b>ვ</b></p> <p>ვან დერ ვალსის ენერგია, 116, 130</p>  |
| <p><b>გ</b></p> <p>გარდასახვა ვერტიკალური ლერძის მიმართ, 54<br/>                 გარდასახვა ჰორიზონტალური ლერძის მიმართ, 53<br/>                 გარდატეხის მაჩვენებელი, 4<br/>                 გეომეტრიული ოპტიმიზაცია, 4, 104, 111, 142<br/>                 გეომეტრიული ტრანსფორმაციები, 54<br/>                 გლობალური მინიმუმი, 109, 133<br/>                 გოლდფარგი, 142</p> | <p><b>ზ</b></p> <p>ზეგამტარმდგომარეობაში გარდაქმნის ტემპერატურა, 11<br/>                 ზედაპირული დაჭიმულობა, 84</p>                         |
| <p><b>დ</b></p> <p>დიელექტრიკული შეღწევადობა, 84<br/>                 დიპოლური მომენტი, 104, 107, 112, 148<br/>                 დუდილის ტემპერატურა, 4, 13, 17, 21</p>   | <p><b>თ</b></p> <p>თერმოდინამიკური პარამეტრები, 23</p>   |
| <p><b>ე</b></p> <p>ეთანი, 108<br/>                 ელემენტის აღმოჩენის წელი, 11<br/>                 ელემენტის დასახელება, 11, 12<br/>                 ელემენტის ჩართვის ინსტრუმენტი, 44<br/>                 ელექტროგამტარობა, 11<br/>                 ელექტრონული პერიოდული ტაბულა, 9</p>  | <p><b>ი</b></p> <p>ინსტუმენტი „კალამი“, 58<br/>                 იონების წარმოქმნის შესაძლებლობა, 22</p>  |
| <p><b>კ</b></p> <p>კინეტიკური ენერგია, 119<br/>                 კოვალენტური, 11, 14, 15<br/>                 კომპლექსური, 6, 7<br/>                 კუთრი თბოტევადობა, 11</p>  | <p><b>ქ</b></p> <p>ლოკალური მინიმუმი, 109<br/>                 ლუისის მჟავა/ფუძურ ქიმია, 28<br/>                 ლობის ტემპერატურა, 11, 13</p> |
| <p><b>ლ</b></p> <p>ლინეარული ენერგია, 119<br/>                 ლობის ტემპერატურა, 11, 13</p>   | <p><b>მ</b></p> <p>მინერალები, 26<br/>                 მოლეკულური მასა, 4, 21, 76, 78</p>  |

მოლეკულური მექანიკა, 4, 103, 105, 106, 113, 114, 161  
 მოლეკულური რეფრაქცია, 84  
 მოლური მოცულობა, 84  
 მონაცემთა ბაზები, 102

**მ**

ობიექტის შემობრუნება, 53  
 ოლიგონუკლეოტიდები, 106  
 ორბიტალზე ელექტრონების განლაგება, 13

**პ**

პარაქორი, 84  
 პოლარიზებულობა, 84, 113, 153, 154  
 პოტენციალები  
 იონიზაციის შესამე, 11, 107, 113, 149  
 იონიზაციის მეორე, 11  
 პროგრამები  
 საილუსტრაციო, 4  
 საინფორმაციო, 3, 4, 5, 6, 7, 29, 62  
 გრაფიკული, 3  
 პროგრამები მარტივი  
 გაანგარიშებისათვის, 4

**რ**

რეაქციის ტიპები  
 ელიმინირება, 23  
 მიერთება, 23  
 ჩანაცვლება, 23  
 რეაქციები  
 ბიოქიმიური, 26  
 გადაჯგუფების, 26  
 ელიმინირების, 26  
 მიერთების, 19, 23, 26, 27, 28, 119  
 პერიციკლური, 26  
 რადიკალური, 26  
 რედოქსი, 26  
 სახელობითი, 26  
 ფოტოქიმიური, 26  
 მრავალსაფეხურიანი, 26  
 რკალების ინსტრუმენტი, 58

ჩართვის, 26  
 ჩანაცვლების, 26  
 რედოქს ქიმია, 28

**ს**

სიმკვრივე, 11, 13, 84, 112, 146, 158, 159, 160  
 სპინური ფუნქცია, 122  
 სპექტრი, 90, 94, 95  
 სპეციფიკური, 6  
 სტრუქტურული ბიბლიოთეკები, 45, 46, 51

**ტ**

ტორსული ენერგია, 114, 115

**ფ**

ფლუტჩერი, 142  
 ფოტოქიმია, 28

**ქ**

ქიმიური ბმა, 29  
 ქიმიური კალკულატორი, 9, 80  
 ქიმიური მოდელირების პროგრამები, 4  
 ქიმიური პროგრამა - ბროუზერები, 4

**შ**

შაბლონები, 47, 49, 51

**წ**

წარმოქმნის სიბოლო, 104, 112, 146, 147, 155  
 წყალბადის მიმართ აქტიურობის მწკრივი, 15

**ჰ**

ჰიპერპოლარიზებულობა, 153

**სარჩევი**

1. პროგრამების კლასიფიკაცია ----- 3  
 2. საცნობარო პროგრამები ----- 9  
 2.1. ქიმიურ ელემენტთა ელექტრონული პერიოდული  
 ტაბულები (პროგრამა TableRus-3.40) ----- 9  
 2.2. პროგრამა Chemical Thesaurus ----- 18  
 2.2.1. პროგრამის ინსტალაცია ----- 18  
 2.2.2. პროგრამის ინტერფეისი ----- 18  
 2.2.3. ქიმიური ნაერთებისა და მათი თვისებების მოძიება  
 სინონიმების მიხედვით ----- 20  
 2.2.4. ქიმიური რეაქციების მონაცემთა ბაზა ----- 23  
 2.2.5. ზოგადი სახის ქიმიური ინფორმაციის ძიება  
 Chemiacal Thesaurus-ის მონაცემთა ბაზაში ----- 24  
 2.2.6. ქიმიური რეაქციების ძიება ტიპებისა და  
 მექანიზმების მიხედვით ----- 26  
 3. ორგანოზომილებიანი გრაფიკული პროგრამები  
 (2D გრაფიკა) ----- 29  
 3.1. სტრუქტურების აგება პროგრამა ChemDraw-ში --- 30  
 3.1.1. სტრუქტურის აგება დასახელების მიხედვით ----- 36  
 3.2. სტრუქტურების აგება პროგრამა ChemSketch-ის  
 გამოყენებით ----- 37  
 3.3. ქიმიური სტრუქტურების აგება პროგრამა ISIS  
 Draw-ში ----- 42  
 3.4. ბიბლიოთეკების გამოყენება სტრუქტურების  
 აგებისათვის ----- 45  
 3.4.1. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა  
 ChemDraw-ში ----- 45  
 3.4.2. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა  
 ChemSketch-ში ----- 46  
 3.4.3. სტრუქტურული ბიბლიოთეკები პროგრამა ISIS  
 Draw-ში ----- 51  
 3.5. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები ----- 51  
 3.5.1. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები  
 პროგრამა ChemDraw-ში ----- 52

|   |    |
|---|----|
| 3.5.2. სტრუქტურების მარტივი ტრანსფორმაციები   |    |
| პროგრამა ChemSketch-ში  | 54 |
| 4. ბიზეს გრაფიკული ელემენტების გამოყენება   | 57 |
| 4.1. გეომეტრიული ელემენტების გამოყენება პროგრამა ChemDraw-ში                        | 58 |
| 4.2. გეომეტრიული ელემენტების გამოყენება პროგრამა ChemSketch-ში                      | 61 |
| 5. სამგანზომილებიანი გრაფიკული პროგრამები (3D-გრაფიკა)                              | 62 |
| 5.1. 3D-გრაფიკული სტრუქტურების აგება ACD Labs პეკეტის საშუალებით                    | 63 |
| 5.2. 3D-გრაფიკული სტრუქტურების აგება Chem 3D-ს საშუალებით                           | 68 |
| 5.3. ტრანსფორმაციები სამგანზომილებიან მოდელებზე                                     | 71 |
| 6. მარტივი საანგარიშო პროგრამები  | 76 |
| 6.1. მოლეკულური მასის განსაზღვრა  | 76 |
| 6.1.1. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამის EniG. Chemistry Assistant საშუალებით | 77 |
| 6.1.2. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამა Chem Sketch-ის საშუალებით             | 78 |
| 6.1.3. მოლეკულური მასის გაანგარიშება პროგრამის Chem Draw საშუალებით                 | 79 |
| 6.2. რეაქციის სტექიომეტრიული კოეფიციენტების ანგარიში                                | 80 |
| 6.3. ხსნარის კონცენტრაციის გაანგარიშება   | 82 |
| 6.4. ნაერთის ფიზიკურ-ქიმიური კონსტანტების ანგარიში                                  | 84 |
| 6.5. ნაერთების ნომენკლატურა   | 87 |
| 6.5.1. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ChemSketch საშუალებით                       | 87 |
| 6.5.2. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ChemDraw საშუალებით                         | 89 |
| 6.5.3. ნივთიერების დასახელება პროგრამის ISIS Draw საშუალებით                        | 90 |
| 6.6. სპექტრების დამუშავება  | 90 |
| 6.6.1. ულტრაიისფერი და ელექტრონული (ხილული) სპექტრების აგება და დამუშავება          | 91 |

|  |     |
|--|-----|
| 6.6.2. ინფრაწითელი სპექტრების აგება და დამუშავება              | 98  |
| 6.6.3. მას-სპექტრების აგება და დამუშავება                      | 98  |
| 6.6.4. <sup>1</sup> H-ბმრ სპექტრების აგება და დამუშავება       | 98  |
| 6.7. მარტივი ქიმიური გაანგარიშებების პროგრამირება              | 99  |
| 7. გამოთვლითი ქიმიის საფუძვლები                                | 102 |
| 7.1. გამოთვლითი მეთოდების საწყისები                            | 103 |
| 7.2. გამოთვლითი მეთოდების საშუალებები                          | 104 |
| 7.3. საუკეთესო მეთოდის შერჩევა                                 | 104 |
| 7.4. გამოთვლითი მეთოდების მოკლე მიმოხილვა                      | 106 |
| 7.5. ზედაპირის პოტენციური ენერჯია                              | 108 |
| 7.6. წერტილოვანი ენერჯიის გაანგარიშება                         | 110 |
| 7.7. გეომეტრიის ოპტიმიზაცია                                    | 111 |
| 7.8. <b>თვინსეპის ანგარიში</b>                                 | 112 |
| 7.9. მექანიკური დინამიკა (მოკლე მიმოხილვა)                     | 113 |
| 7.10. ძალური ველი  | 114 |
| 7.11. მოლეკულური დინამიკის სიმულაცია                           | 118 |
| 7.12. ქვანტური მექანიკის მოკლე მიმოხილვა                       | 119 |
| 7.13. CS MOPAC-ში გამოყენებული მეთოდები                        | 124 |
| 7.14. მოლეკულური მექანიკის (MM2) ანგარიში                      | 128 |
| 7.15. მოლეკულური დინამიკა                                      | 134 |
| 7.16. მოდელების ელექტრონული კონფიგურაციის განსაზღვრა           | 139 |
| 7.17. გადასართავი General (ზოგადი)                             | 141 |
| 7.18. ნაერთის ოპტიმიზაცია გარდამავალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში | 142 |
| 7.19. თვისებების ანგარიში                                      | 144 |
| 7.19.1. წარმოქმნის სითბო $\Delta H_f$                          | 146 |
| 7.19.2. დიპოლური მომენტი                                       | 146 |
| 7.19.3. მუხტები  | 147 |
| 7.20. პოლარიზებულობა   | 151 |
| 7.21. სოლვატაცია წყალში  | 153 |
| 7.22. ზეშეუღლებების ეფექტები                                   | 155 |
| 7.23. სპინური სიმკვრივე  | 156 |
| დანართი A  | 160 |
| დანართი B  | 162 |
| CS MOPAC-ში გამოყენებული დამატებითი ბრძანებები                 | 162 |
| დანართი C  | 165 |

|                               |     |
|-------------------------------|-----|
| *.out ფაილის გამოყენება ----- | 165 |
| ანბანური საძიებელი -----      | 167 |
| სარჩევი -----                 | 169 |
| შენიშვნებისათვის -----        | 173 |

## შენიშვნებისათვის

---



## შენიშვნებისათვის

---

კომპიუტერული უზრუნველყოფა ე. ელიზბარაშვილის

**იბეჭდება ავტორთა მიერ  
წარმოდგენილი სახით**

გადაეცა წარმოებას 10.11.2005. ხელმოწერილია დასაბეჭდად  
02.12.2005. ქალაქის ზომა 60×84 1/16. პირობითი ნაბეჭდი თაბახი 11.  
სააღრიცხვო-საგამომცემლო თაბახი 9. ტირაჟი 100 ეგზ. შეკვეთა №

გამომცემლობა „ტექნიკური უნივერსიტეტი“,  
თბილისი, მ. კოსტავას 77

