ივ.ჯავახიშვილის სახ.თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ზოგიერთი არაორგანული და ორგანული ნაერთის შესწავლა ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდის ფარგლებში.

ლევან ლობჟანიძე

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი,

ხელმძღვანელი -ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორი,პროფესორი:

მიხეილ გვერდწითელი

თბილისი

2013

ანოტაცია

ნაშრომის მიზანს შეადგენდა ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდის ფარგლებში (რნბ– და ქვაზი–რნბ– მატრიცების მედოდის) გამოყენებით ორი კლასის ნაერთების შესწავლა:დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების ჰიდრიდების და ნიტროალკანების.აგებულია და შესწავლილია სამი კორელაციული განტოლება.გამოთვლებმა აჩვენა,რომ კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

Anotation

The purpose of the investigation was,within the scope of topologic indeces method(ANB- and quazi-ANB-matricies method),to investigatetwo classes of compounds:the hydrides of elements of arsenic and nitroalkaenes.Three corelation equations were constructed and investigated.The calculations show,that the correlations are satisfactory.

სარჩევი

ანოტაცია	----------	2
შესავალი	----------	4
1.	ლიტერატურის მიმოხილვა(ტოპოლოგიინდექსები) ----------	4
2.	კვლევის შედეგები ----------	7
2.1.	დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა -	7
2.2.	ნიტროალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ----------	8
დასკვნა	----------	10
ლიტერატურა	----------	11

ზოგიერთი არაორგანული და ორგანული ნაერთის შესწავლა ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდის ფარგლებში.

I. შესავალი

1.1. ლიტერატურის მიმოხილვა (ტოპოლოგიინდექსები)

ქიმიისა და მათემატიკის მიჯნაზე,მათი ერთგვარიშერწყმით ჩამოყალიბდა თანამედროვე თეორიული ქიმიის ერთ–ერთი უახლესი დარგი მათემატიკური ქიმია.ქიმიის ამ მიმართულების ძირითადი მიზანია,თანამედროვე მათემატიკის უმძლავრესი გამოთვლითი აპარატის გამოყენება ქიმიის ამოცანების გადასაჭრელად[1–4].

მათემატიკური ქიმიის ერთ–ერთი უმნიშვნელოვანესი პრობლემაა ტოპოლოგიური ინდექსების (მოლეკულური დისკრეპტორების) გამოყენებით „აღნაგობა–თვისებები“ ტიპის კორეაციული განტოლებების აგება და შესწავლა ქიმიურ ნაერთთა სხვადასხვა კლასისთვის.

ტოპოლოგიური ინდექსები რიცხობრივად ახასიათებენ მოლეკულის აღნაგობას და მათი მნიშვნელობა არ არის დამოკიდებული (ინვარიანტულია) მოლეკულის შესაბამისი გრაფის წვეროებისა და წიბოების ნუმერაციაზე.თქმულიდან ჩანს,რომ ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდი გრაფების თეორიის აქტიურ გამოყენებასთან არის დაკავშირებული.

ქიმიური გრაფის ამსახველი პირველი ტოპოლოგიური ინდექსი შემუშავებული იყო ვინერის მიერ 1947 წელს.ვინერის ინდექსი– $W(G)$ წარმოადგენს რიცხვს,რომელიც ალკანის ნახშირბადული ჩონჩხის G ქიმიურ გრაფაში ყველა წვეროთა წყვილებს შორის არსებული მანძილის (ანუ ბმების რიცხვის) ჯამის ტოლია.

იგი გამოითვლება ფორმულით:

$$W(G) = \sum_{i=1}^{k} iNi$$

სადაც, Niსიმბოლო i-მანძილით დაშორებულ წვეროთა წყვილის რიცხვს აღნიშნავს.ქვემო სქემაზე განხილულია $W(G)$–ს გამოთვლის კონკრეტული მაგალითი:
ნ-ბუტანისათვის:

$$N_1 = 3$$
$$N_2 = 2$$
$$N_3 = 1$$

$$\sum_{i=1}^{k} iNi = 1 \cdot 3 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 1 = 10$$

პლატის ინდექსი– $F(G)$ განისაღვრება,როგორც თითოეული ქიმიური ბმის თანაზიარი ბმების ჯამი.იგი რიცხობრივად G –გრაფის წიბოთა ხარისხების ჯამის ტოლია:

$$F(G) = \sum_{f=1}^{f} dege$$

სადაც, $deg - f$ წიბოს თანაზიარ წიბოთა რიცხვს განსაზღვარს,ხოლო $f - G$ გრაფაში წიბოების საერთო რიცხვია.

დღეისთვის არსებობს 50–ზე მეტი ტოპოლოგიური ინდექსი,რომელთაგან რამოდენიმე შემუშავებულია ქართული მათემატიკური სკოლის მიერ.დაწვრილებით განვიხილოთ ამ ინდექსებს

შორის 2 ინდექსი,რომელიც აგებულია რნბ–მატრიცების და ქვაზი–რნბ მატრიცების საფუძველზე.რნბ–მატრიცის (აბრევიატურა „რნბ“ მიშნავს რიგობრივი ნომერი–ბმა) დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრები,არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიურ ბმათა ჯერადობები.ზოგადად,სამატომიანი ABC მოლეკულის შესაბამის რნბ–მატრიცას გააჩნია სახე:

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

სადაც,Z_A, Z_B, Z_C - შესაბამისად A,B და C ქიმიური ელემენტების რიგობივი ნომერია,Δ_{AB}, Δ_{AC}, Δ_{BC},ქიმიურ ბმათა ჯერადობები.AდაB, BდაC, AდაC ატომებს შორის.მატრიცის დეტერმინანტთა მნიშვნელობების ათობითი ლოგარითმი–$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს.

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

ამ მიზნით მოხდა რნბ–მატრიცის მოდერნიზაცია კვაზი რნბ– მატრიცად(რ$\tilde{\text{ნ}}$ბ)..ეს უკანასკნელი საშუალებას იძლევა, არა მარტო ადეკვატურად აისახოს კონკრეტული მოლეკულის სტრუქტურის სპეციფიკა,არამედ, გამოთვლების შრომატევადობაც მნიშვნელოვნად შემცირდეს.

ისიც უნდა აღინიშნოს,რომ ეს მიდგომა საშუალებას იძლევა მოლეკულა წარმოვაჩინოთ,როგორც ძირითადი სტრუქტურული ფრაგმენტის(„ჩონჩხის“),ჩამნაცვლებელსა და სარეაქციო ცენტრისგან შემდგარი სისტემა,რაც ტრადიციული მიდგომაა ორგანულ ქიმიაში.ამგვარად,ფორმალურად კვაზი რნბ–მატრიცას სახე აქვს,ოღონდ ამ შემთხვევაში A,BდაC წარმოადგენენ არა ინდივიდუალურ ქიმიურ ელემენტებს,არამედ, მოლეკულის სტრუქტურულ ფრაგმენტებს.შესაბამისად, Z_A, Z_B, Z_C სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამებია:

$$Z_A = \sum z_a$$

$$Z_B = \sum z_b$$

$$Z_C = \sum z_c$$

ასე მაგალითად,ალანინის $(NH_2 - CH_2 - COOH)$შესაბამისი რნბ–მატრიცა მეათე რანგისაა. თუ განვიხილავთ მოდელს,სადაც:$A \equiv NH_2$, $B \equiv CH_2$, $D \equiv COOH$შესაბამისი კვაზი რნბ–მატრიცის რანგი სამის ტოლი ხდება.ეს მოდელი ლოგიკურია ქიმიური თვალსაზრისითაც–ამინოძმარმჟავა,ამინო–ჯგუფის, CH_2 ფრაგმენტისა და კარბოქსილის ჯგუფის „ქიმიური“ ერთიანობაა.

ამგვარად იგება წრფივი კორეაციული განტოლებები:

$$\rho_1 = a_1 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + b_1$$

$$\rho_2 = a_2 \lg(\Delta_{\tilde{\text{რ}}\text{ნ}\tilde{\text{ბ}}}) + b_2 \qquad (4)$$

სადაც, ρ – მოლეკულის ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრია ($T_{\text{ლღ.}}$, $T_{\text{დუღ.}}$, n_D^{20}, d_4^{20} და სხვა);

a_1, a_2, b_1, b_2– ნამდვილი რიცხვებია. ამ კორელაციური განტოლებების კონსტრუირება ხდება კომპიუტერზე უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით. მათი სიზუსტის მახასიათებელია ე.წ. ***r*** კორელაციულიკოეფიციენტი:

$$r = \sqrt{\frac{\left(\sum xy\right)^2}{\sum x^2 \sum y^2}}$$

ჯაფემ შემოიტანა კორელაციის სიზუსტის კრიტერიუმები:

r = 1 – იდეალური კორელაცია.

r>0,99 – ბრწყინვალე კორელაცია.

0,99 >r> 0,95 – დამაკმაყოფილებელი კორელაცია.

0,95 >r> 0,90– მიახლოებითი კორელაცია.

რნბ და ქვაზი-რნბ მატრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია რამდენიმე ათეული კლასი, როგორც არაორგანული, ისე ორგანული ნაერთებისა [5-11].

II. კვლევის შედეგები

2.1. დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

ჩავატარეთ დარიშხანის ქვეჯგუფის **(As, Sb, Bi)** ჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. ამ მოლეკულათა ზოგადი ფორმულაა:

სადაც, **X=As, Sb, Bi**. შესაბამისრნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{Vmatrix} Z_X & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{Vmatrix}$$

ამ მატრიცის დეტერმინანტი ტოლია **Δრნბ = ZX – 3**

ცხრილში მოტანილია **lg(Δრნბ), და** $\Delta H^0_{f,298}$ დარიშხანის ჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდებისათვის.

ცხრილი 1.

H_3X	H_3As	H_3Sb	H_3Bi
lg(Δრნბ)	1,48	1,68	1,90
$\Delta H^0_{f,298}$	66,4	145	(234)

ავაგეთ კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H^0_{f,298} = 393{,}0\lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 512{,}2.$$

$\Delta H^0_{f,298}$ **H_3Bi**- ისთვის გამოვთვალეთ თეორიულად,კორელაციური განტოლების გამოყენებით.

2.2. ნიტროალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [13].

სხვაობის დემონსტრირებისთვის რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდების სპეციფოკაში, მოგვყავს ჩვენს მიერ ადრე შესწავლილი ნიტროალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევის შედეგები ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის გამოყენებით. ნიტროალკანების ზოგადი ფორმულაა:

$$R - NO_2$$

სადაც, R – ალკილის რადიკალია.

ამ ნაერთებისათვის შევიმუშავეთ მარტივი მოდელი:

$$R - X$$

სადაც, $X=NO_2$.

შესაბამის კვაზი-რნბ-მატრიცას გააჩნიაზოგადი სახე:

$$\begin{Vmatrix} Z_R & 1 \\ 1 & Z_x \end{Vmatrix}$$

ასე მაგალითად, ნიტრომეთანებისათვის, ქვაზი-რნბ-მატრიცას გააჩნია კონკრეტული სახე:

$Z_{CH_3} = 9;\ Z_{NO_2} = 23.$

$$\begin{Vmatrix} 9 & 1 \\ 1 & 23 \end{Vmatrix}$$

ცხრილში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$, $T_{\text{დუღ.}}$, და d_4^{20} ზოგიერთი ნიტროალკანისათვის.

<u>ცხრილი 2.</u> ზოგიერთი ნიტრონაერთის $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$, $T_{\text{დუღ.}}$, და d_4^{20}

ნიტროალკანი	$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$,	$T_{\text{დუღ.}}$,	d_4^{20}

CH_3NO_2	2,31	101,4	1,138
$C_2H_5NO_2$	2,53	114,0	1,050
$C_2H_7NO_2$	2,76	131,6	1,001

ვაგებთ ორ კორელაციურ განტოლებას:

$$d_4^{20} = -0{,}304 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 1{,}840$$

$$T_{\text{დუღ.}} = 66{,}67 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 52{,}50.$$

კორელაციის კოეფიციენტი ***r*** შესაბამისად ტოლია: 0,988; 0,987. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაცია კარგია.

დასკვნა

1. რნბ–მატრიცების მეთოდის ფარგლებში აგებულია შესწავლილია დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების ჰიდრიდები–XH_3. აგებულია კორელაციური განტოლება $\Delta n \sim lg(\Delta_{\text{რნბ}})$.კორელაცია დამაკმაყოფილებელია;
2. ქვაზი-რნბ–

   მატრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია ნიტროალკანებისათვის ორი კორელაციური განტოლება: $d_4^{20} \sim lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ დაTდუღ. $\sim lg(\Delta_{\text{რნბ}})$.კორელაციები დამაკმაყოფილია.

ლიტერატურა

1. გ. გამზიანი, ნ. კობახიძე, მ. გვერდწითელი. ზოგი რამ ტოპოლოგიურიინდექსებისშესახებ. თბილისი, 1995.
2. გ. ლეკიშვილი, ლ. ასათიანი. მოლეკულურიდისკრიპტორებიელე-მენტორგანულნაერთთაქიმიაში. თბილისი, 1998.
3. M. Gvedtsiteli, G. Gamziani, I. Gverdtsiteli. The contiguity matrices of molecular graphs and their modifications. Tbilisi, 1996.
4. Сидамонидзе Н. Н. Купатадзе К. Т. Гвердцители М. И. Теоретическое иследованиекорелации. «Структура-свойства» в рамках методов ПНС –квази ПНС и ЭП –матрици. Прикладнаяфизика, 2009, №6, с. 36-39.
5. M. I. Gvedtsiteli, N. G. Vepkhishvili. Algebric-chemical Investigation of Complex Molecule within the Scope of the Quasi-Matrices Method. Georg. Eng. News, 2000, #4, p. 146.
6. N. Iashvili, E. Gelashvili, G. Gamiziani, M. Gverdtsiteli. Theoretical Study of some Thiiranes within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Bull. Georg. Acad. Sci., 2000, 161. #2, p. 242.
7. N. Telia, M. Gverdtsiteli, O. Manjgaladze. Investigation of Rodanines within the Scope of the Quasi –ANB-Matrices Method Georg. Eng. News, 2001, v. 1, #1, p. 53.
8. მ. გვერდწითელი, კ. ატალაი. პოლი (α-ოლეფინების) ალგებრულ-ქიმიურიკვლევაქვაზი-რნგ-მატრიცებისმეთოდისფარგლებში. საქ. ქიმ. ჟურნ. 2002, ტ. 2, №1, გვ. 61.
9. G. Chachava, M. Gverdtsiteli. Theoretical Investigation of Diphenylmethylalkylarenium Perchlorates within the Scope of the Quasi –ANB-Matrices Method. Bull. Georg. Acad. Sci., 2001, 164, #1, p. 68.
10. M. G. Gverdtsiteli, G. Otinashvili, M. Bedinashvili, M. Gverdtsiteli, N. Ovsianikova. Algebric-chemical Investigation of Monocarbon Acids withers the Scope off the Quasi –ANB-Matrices Method. Georg. Chem. Journ., 2003, v. 3, #3, p. 244.

11. M. N. Javus, M. I. Gverdtsiteli. Algebrical-chimical Investigation of Primary Amin within the Scope of the Quasi –ANB-Matrices Method. Georg. Cem. Journ., 2003, v. 3, #4, p. 353.
12. გ. ჩაჩავა, მ. რუსია, ლ. ლობჟანიძე, მ. გვერდწითელი. დარიშხანისქვეჯგუფისელემენტებისმათემატიკურ-ქიმიურიგამოკვლევა. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმიისსერია, 2012. ტ. 38, №2-3, გვ. 271.
13. მ. რუსია, ლ. ლობჟანიძე, მ. გვერდწითელი. ნიტროალკანებისმათემატიკურ-ქიმიურიგამოკვლევავქზირნ-მატრიცებისმეთოდისფარგლებში. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმიისსერია, 2010. ტ. 36, №3, გვ. 334.