

ნუნუ ცეცაძე

მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციები
საქართველოში

წარმოდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის
მოსაპოვებლად
სადოქტორო პროგრამა - ქიმია
შიფრი - 0503

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
თბილისი, 0175, საქართველო
2021

საავტორო უფლება ©2021 წელი, ნუნუ ცეცაძე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტი

ჩვენ, ქვემოთ ხელისმომწერი ვადასტურებთ, რომ გავეცანით ცეცაძე ნუნუს მიერ შესრულებულ სადისერტაციო ნაშრომს დასახელებით: "მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციები საქართველოში" და ვაძლევთ რეკომენდაციას საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის სადისერტაციო საბჭოს მის განხილვას დოქტორის ხარისხის მოსაპოვებლად

_____ 2021

ხელმძღვანელი:

ქ.მ.დ. , პროფესორი თ. წივწივაძე

რეცენზენტი:

რეცენზენტი:

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

2021 წელი

ავტორი: ცეცაძე ნუნუ

დასახელება: "მათემატიკური ქიმიის განვითარების ტენდენციები საქართველოში"

ფაკულტეტი: ქიმიური ტექნოლოგია და მეტალურგია

ხარისხი: ქიმიის დოქტორი

სხდომა ჩატარდა: 2021

ინდივიდუალური პროცენტების ან ინსტიტუტები მიერ შემომოყვანილი დასახელების დისერტაციის გაცნობის მიზნით მოთხოვნის შემთხვევაში მისი არაკომერციული მიზნებით კოპირებისა და გავრცელების უფლება მინიჭებული აქვს საქართველოს ტექნიკურ უნივერსიტეტს.

ავტორის ხელმოწერა

ავტორი ინარჩუნებს დანარჩენ საგამომცემლო უფლებებს და არც მთლიანი ნაშრომის და არც მისი ცალკეული კომპონენტების გადაბეჭდვა ან სხვა რაიმე მეთოდით რეპროდუქცია დაუშვებელია ავტორის წერილობითი ნებართვის გარეშე.

ავტორი ირწმუნება, რომ ნაშრომში გამოყენებული საავტორო უფლებების დაცულ მასალებზე მიღებულია შესაბამისი ნებართვა (გარდა ის მცირე ზომის ციტატებისა, რომლებიც მოითხოვენ მხოლოდ სპეციფიკურ მიმართებას ლიტერატურის ციტირებაში, როგორც ეს მიღებულია სამეცნიერო ნაშრომების შესრულებისას) და ყველა მათგანზე იღებს პასუხისმგებლობას.

რეზიუმე

თანამედროვე ქიმიის ერთ-ერთ უმნიშვნელოვანეს პრობლემას წარმოადგენს ნივთიერებათა თვისებებისა და რეაქციისუნარიანობის მოლეკულათა აღნაგობაზე დამოკიდებულების კანონზომიერებათა დადგენა. "შედგენილობა-აღნაგობა-თვისება" კორელაციების გავლენის ძირითად საშუალებად მათი მათემატიკური მოდელირება გვევლინება. ქიმიურ გრაფთა თეორიის თანახმად, რომელიც ფართოდ გამოიყენება ქიმიურ და ბიოლოგიურ პროცესთა მოდელირებისთვის, მოლეკულის მათემატიკურ მოდელს წარმოადგენს გრაფი-დისკრეტულ-ალგებრული ობიექტი, ხოლო ამ უკანასკნელის ინვარიანტები (ტოპოლოგიური ინდექსები) განიხილება ქიმიურ სტრუქტურათა მათემატიკურ დესკრიპტორებად რაოდენობით "აღნაგობა-თვისება" სტატისტიკურ კორელაციებში.

ჩვენს მიერ ნაშრომში განხილულია უმაღლესი ალგებრის ელემენტები - გრაფები, მატრიცები, დეტერმინანტები და მათი გამოყენება ქიმიურ სისტემებთან მიმართებაში. ზემოაღნიშნული მათემატიკური კონსტრუქციები წარმოადგენენ თანამედროვე თეორიული ორგანული ქიმიის ძირითად ცნებებს, რომლებიც სადღეისოდ მეტად აქტუალურია და მის შემდგომ განვითარებას ემსახურება.

სადისერტაციო ნაშრომს, შეიძლება ითქვას, რომ საფუძვლად უდევს მათემატიკური ქიმიის ქართული სკოლის (პროფ. მიხეილ გვერდწითელი) მიერ შემუშავებული (მრავალთაგან) ოთხი ძირითადი ტოპოლოგიური ინდექსი, რომლებიც აგებულია რნბ-, ქვაზი - რნბ-, ფსევდო - რნბ- და ეპ-მატრიცების ბაზაზე და წარმოადგენენ ამ მატრიცების დეტერმინანტთა მნიშვნელობების ათობით ლოგარითმებს.

დისერტანტის მიერ დეტალურად გაანალიზებულია ზემოაღნიშნული მატრიცების სტრუქტურები და სავსებით სამართლიანად მინიშნებულია, რომ რნბ-მატრიცის რანგი მის შესაბამის მოლეკულაში შემავალ ატომთა რიცხვის ტოლია, ამიტომ გამოთვლები შედარებით დიდი მოლეკულებისთვის საკმაოდ შრომატევადია. სწორედ ამ მიზეზით მოხდა რნბ-მატრიცის მოდერნიზაცია ქვაზი-რნბ-მატრიცად (რნბ), რაც საშუალებას იძლევა არა მარტო ადექვატურად აისახოს კონკრეტული მოლეკულის სტრუქტურის სპეციფიკა, არამედ გამოთვლების შრომატევადობაც მნიშვნელოვნად შემცირდეს. ასეთი მიდგომა საშუალებას იძლევა მოლეკულა წარმოჩნდეს, როგორც ძირითადი სტრუქტურული ფრაგმენტის, ჩამნაცვლებლისა და სარეაქციო ცენტრისაგან შემდგარი სისტემა.

იმ შემთხვევაში, როდესაც სტრუქტურის დახასიათებისას მიზანშეწონილია ატომთა იზოლირებული განხილვა გამოიყენება ფსევდო-რნბ-მატრიცები (რნბ), რომელთა დიაგონალური ელემენტებია, როგორც ცალკეული ატომების რიგობრივი, ასევე სხვადასხვა სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ელემენტების რიგობრივი ნომრების ჯამი. ეპ-მატრიცის შემთხვევაში დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ელექტროუარყოფითობები, არადიაგონალური -

შესაბამის ბმათა პოლარობა, ხოლო მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობით ლოგარითმები - $\lg(\Delta_{\text{კ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს.

დისერტანტის მიერ, ორგანული რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის ალგებრული შეფასებისთვის, კონსტრუირებულია ქიმიური რეაქციების მიმდინარეობის სტრუქტურული სირთულის ალგებრული მოდელი, რომლის საფუძველზე დადგენილია, რომ მათი დეტერმინანტები წარმოქმნიან ახალი ტოპოლოგიური ინდექსების ჯგუფს, რომლებიც შეიძლება გამოყენებულ იქნენ "აღნაგობა-თვისება" კორელაციის გამოსავლენად ორგანულ ნაერთთა ცალკეულ ჰომოლოგიურ რიგებში.

მაძიებლის მიერ ჩატარებულია სწორხაზოვანი (ნორმალური) ალკანების, ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის, ბის-(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულების ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა, შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი, კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები, ჯაფეს კრიტერიუმით კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

განხორციელებულია ტეტრამინოპლატინა (II)-ის დიჰალოგენირების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში, შემუშავებულია მოდელი და შესაბამისი ფსევდო-რნბ-მატრიცის ფორმა. ცხრილში მოტანილია - $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ და $T_{\text{დამლ}}$. ამ ნაერთებისათვის. კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება, ჯაფეს კრიტერიუმით კორელაციები დამაკმაყოფილებელია. $T_{\text{დამლ}}$ ტეტრამინოდიფთორიდისთვის თეორიულად გამოთვლილია შესაბამისი ფორმულის საფუძველზე.

დისერტანტის მიერ ჩატარებულია წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების და პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში და შემუშავებულია ახალი ტიპის ტოპოლოგიური ინდექსი - ბლოკ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი $\lg(\Delta_B)$. შემდეგი ლოგარითმის საფუძველზე აგებულია ბლოკ-მატრიცა და ბენზოლის ბირთვები განხილულია ერთიან "ბლოკად", რომელზედაც ხდება სხვა სტრუქტურული ბლოკის წრფივად მიერთება (მაგ. ნაფტალინისა და ანტრაცენისთვის) და ორივე ნაერთის შემთხვევაში გამოყენებულია მარტივი მოდელი, რომელშიც X შეესაბამება გარკვეულ სტრუქტურულ ფრაგმენტს, Y - მოლეკულის დანარჩენ ნაწილს. მოდელის შესაბამის B - მატრიცას გააჩნია გარკვეული ფორმა: Z_x-X და Z_y-Y სტრუქტურულ ფრაგმენტში შემავალი ქიმიური ელემენტების რიგობრივი ნომრების ჯამია: X- და Y-ფრაგმენტებს შორის არის ფორმალური ორმაგი ბმა. ასევე წარმოდგენილია $\lg(\Delta_B)$, $-X \cdot 10^6$ (დიაგნოსტიკური ამთვისებლობა) და E/β (ბმების π -ელექტრონული ენერგია) ნაფტალინიდან ჰექსაცენის ჩათვლით წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადებისთვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები და გამოთვლილია კორელაციის კოეფიციენტები, რომლებიც ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით დამაკმაყოფილებელია.

ჩვენს მიერ ჩატარებულია მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში, რომელიც მოიცავს ჯაჭვური პროცესების უმნიშვნელოვანეს (სიჩქარის განმსაზღვრელი) სტადიებს. ყველა ამ პროცესისთვის შემუშავებულია მარტივი მოდელი $X-M+ \cdot Y \rightarrow X \cdot +H - Y$, სადაც $X \equiv CH_3$, $Y \equiv Cl, Br, I$. რეაქციის მატრიცული ჩანაწერია ფსევდო - რნბ - მატრიცების სახით. გამოთვლების მიხედვით ჩანს, რომ ამ რეაქციისთვის $\Delta r > 0$. აქედან გამომდინარე, პროცესს ახლავს სისტემის სირთულის ზრდა.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება და გამოთვლილია შესაბამისი კორელაციის კოეფიციენტი (r), რომელსაც ჯაფეს კრიტერიუმით აქვს დამაკმაყოფილებელი კორელაცია.

გარკვეულ მნიშვნელობას იძენს AB_n ტიპის მოლეკულები და გრაფი ვარსკვლავის ერთი თვისება, რომლის ერთ-ერთი წვეროს ხარისხია $n(n \geq 2)$, ხოლო დანარჩენების 1 და, რომელსაც "ვარსკვლავი" ეწოდება. მოყვანილია "ხუთქიმიანი ვარსკვლავი" და მისი შესაბამისი ფსევდოთანაზიარობის მატრიცა. თანაზიარობის მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია წიბოების ჯერადობა (განხილულ შემთხვევაში - "1" და "5"), ხოლო არადიაგონალური წვეროების ხარისხი, ჩვენს მიერ დამტკიცებულია თეორემა იმის შესახებ, რომ გრაფი "ვარსკვლავის" ფსევდოთანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტი ნულის ტოლია. გრაფი "ვარსკვლავი" წარმოადგენს რიგი მოლეკულების ფორმალურ ალგებრულ მოდელს.

ჩვენი ნაშრომის შედეგებს აქვს საკმაოდ დიდი თეორიული და პრაქტიკული მნიშვნელობა მათემატიკური ქიმიის განვითარებისათვის საქართველოში. მიღებული შედეგების საფუძველზე შესაძლებელია კორელაციების "აღნაგობა-ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები" გამოვლენა-შესწავლა არაორგანულ, კომპლექსნაერთთა და ორგანული ქიმიის სხვადასხვა მიმართულებისთვის. კონსტრუირებული ტოპოლოგიური ინდექსების საშუალებით შესაძლებელია ნაერთთა გარდაქმნების კინეტიკური მახასიათებლების ალგებრულ-ქიმიურ ასპექტში დახასიათება.

შესრულებული სამუშაოს ძირითადი ("აღნაგობა - თვისებები") შედეგების გამოყენება შეიძლება სასწავლო-საცნობარო და საინფორმაციო ლიტერატურაში, ქიმიის სალექციო კურსში რჩეული თავების კითხვისას და სამეცნიერო - კვლევით ლაბორატორიებში ექსპერიმენტული სამუშაოების შესრულების დროს.

Abstract

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

A simple model $X-K + \cdot Y \rightarrow X \rightarrow + H-Y$ has been developed for all these processes, where $X \equiv \text{CH}_3$, $Y \equiv \text{Cl, Br, I}$. The reaction matrix record is in the form of pseudo-RNA matrices. The calculations show that for this reaction $\langle r \rangle > 0$. Therefore, the process is accompanied by an increase in the complexity of the system.

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

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

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

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

გამოვხატავ უდიდეს პატივისცემას ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის, საქართველოს საინჟინრო მეცნიერებათა აკადემიის აკადემიკოსის, ნიუ-იორკის (აშშ) მეცნიერებათა აკადემიის წევრის, საქართველოს სახელმწიფო პრემიის ლაურეატის მეცნიერებისა და ტექნიკის დარგში, ავტორს "ზოგადი ქიმია" საუკეთესო სახელმძღვანელოსთვის გამომცემლობა "მესხეთის" პრემიის ლაურეატის უმაღლესი სასწავლებლებისათვის, ქიმიის საყმაწვილო ენციკლოპედიის ავტორის, ბიოლოგიურად აქტიურ ნივთიერებათა კვლევის სამეცნიერო ცენტრის ხელმძღვანელის, ღირსების მედლით დაჯილდოვებულის, პროფესორ თენგიზ წივწივაძის მიმართ და ვუხდი უღრმეს მადლობას ჩემდამი გაწეული საუკეთესო სამეცნიერო ხელმძღვანელობისათვის იმ ზრუნვისა და თანადგომისათვის რასაც ყოველთვის ვგრძნობდი.

ასევე უღრმეს მადლობას ვუხდი აწ განსვენებულ თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის პროფესორს, ზოგადი, არაორგანული და მეტალორგანული ქიმიის კათედრის ხელმძღვანელს, ბატონ მიხეილ გვერდწითელს ჩემდამი გაწეული ნაყოფიერი სამეცნიერო ხელმძღვანელობისა და დიდი მხარდაჭერისათვის.

შინაარსი

შესავალი.....	15
1. ლიტერატურის მიმოხილვა	18
1.1. იზომერების გენერაცია და კლასიფიკაცია	18
1.2. ტოპოლოგიური ინდექსების შემუშავება და მათ ბაზაზე კორელაციური განტოლებების „აღნაგობა-თვისებები“ კონსტრუირება და გამოკვლევა.....	26
1.3. ქიმიური რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა	65
1.4. ორგანული რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის აღგებრული შეფასება	76
1.5. გეომეტრიული და ოპტიკური იზომერების აღწერა (3D ინდექსები).....	85
2. შედეგები და მათი განსჯა	89
2.1. სწორხაზოვანი (ნორმალური) ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.....	90
2.2. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში	91
2.3. ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.....	93
2.4. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში	95
2.5. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში	96
2.6. პიროლის და მისი ჰალკოგენის ანალოგების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.....	98
2.7. მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ- ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში	99
2.8. AB_n ტიპის მოლეკულები და გრაფი „ვარსკვლავის“ ერთი თვისება	100
დასკვნა.....	102
გამოყენებული ლიტერატურა	104

ცხრილების ნუსხა

ცხრილი 1.	ორგანულ ნაერთებში იზომერიის ძირითადი ტიპების კლასიფიკაცია	19
ცხრილი 2.	იზომერების, ოჯახების და ზეოჯახების რიცხვი C_3H_8 -დან $C_{10}H_{22}$ - მდე	21
ცხრილი 3.	ოჯახებთა ტიპები C_3H_8 -დან C_8H_{18} -მდე	22
ცხრილი 4.	ზეოჯახების ტიპი C_3H_8 -დან $C_{15}H_{32}$ -მდე	23
ცხრილი 5.	ქრომ(II)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და დუდილის ტემპერატურების მნიშვნელობები	36
ცხრილი 6.	ფოსფორ(III)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, ლლობის და დუდილის ტემპერატურების მნიშვნელობები.....	37
ცხრილი 7.	ვერცხლის (I)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, წარმოქმნის ენტალპიის, სტანდარტული ენტროპიის და ჯიბსის პოტენციალის მნიშვნელობები	38
ცხრილი 8.	ჩაუნაცვლებელი ციკლოალკანებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის ენტალპიის და დუდილის ტემპერატურის მნიშვნელობები	38
ცხრილი 9 .	ჰალოგენწყალბადებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის და აორთქლების სითბო	39
ცხრილი 10.	V ჯგუფის მთავარი ქვეჯგუფის ელემენტთან ჰიდრიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, სიმკვრივის, სტანდარტული ენტალპიის, ენტროპიისა და ჯიბსის პოტენციალის მნიშვნელობები	40
ცხრილი 11.	კობალტის (II) ჰალოგენიდების ტოპოლოგიური ინდექსების, ლლობისა და დუდილის ტემპერატურები, სითბოტევადობები, წარმოქმნის ენტალპიები.....	41
ცხრილი 12.	ტუტე ლითონების ჰალოგენიდების შესაბამისი ტოპოლოგიური ინდექსები კრისტალური და მესრის ენერგიები.....	42
ცხრილი 13.	დარიშხანის (III) ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების მნიშვნელობები, დუდილის ტემპერატურების და წარმოქმნის სითბოს.....	43
ცხრილი 14.	დარიშხანის ჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების და წარმოქმნის სითბოს მნიშვნელობები	43

ცხრილი 15.	დიოქსიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, ლლობის ტემპერატურების, წარმოქმნის სიძაბის და ჯიბის პოტენციალის მნიშვნელობები	44
ცხრილი 16.	ჰალოგენწყალბადებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, წარმოქმნის სიძაბის, ჯიბის პოტენციალის, ბმის ენერჯისა და დიპოლური მომენტის მნიშვნელობები	45
ცხრილი 17.	მეტაკრილის მჟავას ზოგიერთი ესტერის შესაბამისი ტოპოლოგიური ინდექსების, სიმკვრივის და გარდატეხის მაჩვენებლების მნიშვნელობები	46
ცხრილი 18.	კარბონმჟავებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დუდილის ტემპერატურის და სიმკვრივის მნიშვნელობები.....	47
ცხრილი 19.	ზოგიერთი სილანისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლლობის და დუდილის ტემპერატურები	48
ცხრილი 20.	ფეროცენის რიგის α -ზოგიერთი გლიკოლისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლლობის ტემპერატურა.....	49
ცხრილი 21.	$[(\text{C}-\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4)_2\text{AsR}(\text{CH}_3)]\text{I}$ ნაერთებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლლობის ტემპერატურები	50
ცხრილი 22.	$[(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{As}(\text{CH}_3)\text{R}]\text{ClO}_4$ ნაერთებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლლობის ტემპერატურები.....	51
ცხრილი 23.	ზოგიერთი ნიტრონაერთების ტოპოლოგიური ინდექსები, ლლობის ტემპერატურები და სიმკვრივე	52
ცხრილი 24.	ზოგიერთი 2-პ-ნიტროფენილინდოლის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლლობის ტემპერატურები და მოლეკულური რეფრაქციები	53
ცხრილი 25.	ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების და სტანდარტული ენტროპიების მნიშვნელობები	54
ცხრილი 26.	ზოგიერთი ორგანოჰალოგენგერმანიუმის ჰიდრიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, გარდატეხის მაჩვენებლის და სიმკვრივის მნიშვნელობები.....	55
ცხრილი 27.	ზოგიერთი ორგანოგერმანიუმიზოციანატისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დუდილის ტემპერატურების და სიმკვრივის მნიშვნელობები	56
ცხრილი 28.	მონოჰალოგენმეთანების ტოპოლოგიური ინდექსები, პოლარიზებადობა და იონიზაციის პირველი პოტენციალი.....	57
ცხრილი 29.	ვერცხლისწყლის (I) ჰალოგენიდების ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სიძაბის, სტანდარტული ენტროპია და ჯიბის პოტენციალი	58
ცხრილი 30.	ნორმალური ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და სტანდარტული ენტროპია.....	58

ცხრილი 31. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Hal}]$ სტრუქტურისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და რეაქციის სიჩქარის მუდმივების მნიშვნელობები	60
ცხრილი 32. XH_4 მოლეკულებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო, დუდილის ტემპერატურა და წარმოქმნის სითბო.....	61
ცხრილი 33. ტიტანის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი.....	61
ცხრილი 34. სილიციუმის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი	62
ცხრილი 35. ურანის ქლორიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი	63
ცხრილი 36. ბორის ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ლღობის ტემპერატურა.....	63
ცხრილი 37. ალუმინის ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი	64
ცხრილი 38. ურანის ოქსიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და წარმოქმნის სითბო	65
ცხრილი 39. რადიკალური ელიმინირების რეაქციებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და ენერგიების მნიშვნელობები.....	70
ცხრილი 40. ჰიდრაზონსა და თიანოლქლორიდს შორის ურთიერთქმედების რეაქციის ბმების გადანაწილების სირთულის მატრიცა.....	78
ცხრილი 41. ნორმალური ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და იონიზაციის ენერგიები.....	90
ცხრილი 42. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერინდოლებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლღობის ტემპერატურები და მოლეკულური რეფრაქციები.....	92
ცხრილი 43. ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლღობის ტემპერატურები.....	95
ცხრილი 44. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების ტოპოლოგიური ინდექსები და დაშლის ტემპერატურები	96
ცხრილი 45. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დიამაგნიტური ამთვისებლობის და ბმების π ელექტრონული ენერგიის მნიშვნელობები.....	97
ცხრილი 46. ჰეტეროციკლური ნაერთებისთვის მოყვანილია ტოპოლოგიური ინდექსები და ნაერთთა იონიზაციის პირველი პოტენციალი.....	98

შესავალი

ზუსტა რანგში საბუნებისმეტყველო მეცნიერების „გაწევრიანების“ უმთავრესი კრიტერიუმია მისი მათემატიზაციის დონე, რადგან „ბუნება მათემატიკის ენით მეტყველებს“ (გალილეო გალილეი). ეს პროცესი ფიზიკაში XX საუკუნის შუა წლებში, პრაქტიკულად დასრულდა. ქიმიის მათემატიზაციის დასასრულიც, ჩვენი აზრით, შორს არაა; ბიოლოგიის მათემატიზაცია ამჟამად მიმდინარეობს.

თანამედროვე ქიმია იმ ფუნდამენტურ მეცნიერებათა რიგს განეკუთვნება, რომლის გავლენა XX-XXI საუკუნეების ცივილიზაციაზე ყოვლისმომცველია [1-4]. საოცრად დიდია ქიმიის შესასწავლი ობიექტების - ნივთიერებების - რიცხვი. დღეისთვის ცნობილ ნივთიერებათა რაოდენობამ 21 მილიონს გადააჭარბა. ამასთან, რაც განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია, მათი დაახლოებით 95% ხელოვნურადაა დასინთეზებული. გარდა ამისა, თუ XIX საუკუნეში ქიმია დაყოფილი იყო მხოლოდ ოთხ ძირითად დარგად (არაორგანული, ორგანული, ფიზიკური და ანალიზური), დღეისთვის არსებული ქიმიურ დისციპლინათა რიცხვი 100-ზე მეტია. ქიმიის ასეთი ინტენსიური დიფერენციის მიზეზი ზედმიწევნით ზუსტადაა წარმოჩენილი ფიზიკურ-ორგანული ქიმიის ერთ-ერთი ფუძემდებლის, ჰამეტის სიტყვებში [5]:

„ყოველი მეცნიერების განვითარების ერთ-ერთ უზოგადეს ტენდენციას წარმოადგენს ყურადღების დროებითი შესუსტება იმ მოვლენებისადმი, რომლებიც იმყოფება რამდენიმე მონათესავე მეცნიერების მიჯნაზე. გარკვეული დროის შემდეგ ეს ხარვეზები თავს იჩენს და მათ ლიკვიდაციას პრინციპული ხასიათი ენიჭება. სწორედ, ამ დროს ჩნდება მეცნიერების ახალი დარგი და რამდენიმე წელიწადში ოფიციალურ სახელწოდებასაც ღებულობს“.

სწორედ, ასეთი „მექანიზმით“, ქიმიისა (ძირითადად - ორგანულის) და მათემატიკის (ძირითადად - უმაღლესი ალგებრის) მიჯნაზე, მათი ერთგვარი სიმბიოზით, ჩამოყალიბდა თანამედროვე თეორიული ქიმიის

ახალი დარგი - მათემატიკური ქიმია. ამ დისციპლინის სტრატეგიული მიზანია თანამედროვე მათემატიკის უმძლავრესი აპარატის (ჯგუფთა თეორია, გრაფების თეორია, ინფორმაციის თეორია და სხვ.) გამოყენება ქიმიის ამოცანების გადასაჭრელად [6-8].

მათემატიკური ქიმიის პრობლემატიკა ფრიად ვრცელია, მათ შორის ძირითადია:

1. ბრუტო-ფორმულის მიხედვით ნაერთთა შესაბამისი იზომერების რიცხვის განსაზღვრა და მათი კომპიუტერული გენერაცია (ე.წ. „ჩამოთვლა“); იზომერების კლასიფიკაცია;

2. ტოპოლოგიური ინდექსების (მოლეკულური დესკრიპტორების) გამოყენებით „აღნაგობა-თვისებები“ ტიპის კორელაციული განტოლებების აგება და შესწავლა;

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

4. ახალი (უცნობი) რეაქციების კომპიუტერული ძიება;

5. ნაერთთა სინთეზის ოპტიმალური გზების კომპიუტერული დაგეგმვა და სხვ.

მათემატიკური ქიმია დღეისათვის წარმოადგენს ინტენსიურად განვითარებად მეცნიერებას. მსოფლიოში გამოდის, რამდენიმე დარგობრივი სამეცნიერო ჟურნალი, სისტემატურად ტარდება სემინარები და კონფერენციები, იწერება სახელმძღვანელოები და მონოგრაფიები. უფრო მეტიც, მათემატიკურმა ქიმიამ თავად განიცადა განშტოება - წარმოიქმნა: ქემოინფორმატიკა, კომპიუტერული სინთეზი, ტოპოლოგიური ქიმია და სხვ.

საქართველოში მათემატიკური ქიმიის „დაბადების“ თარიღად პირობითად შეიძლება მივიჩნიოთ 1983 წელი, როდესაც პროფ. მიხეილ გვერდწითელის წიგნში „ორგანულ ნაერთთა ნომენკლატურის პრინციპები“ [9] წარმოდგენილი იყო მოლეკულის მათემატიკური ჩაწერის ახალი მეთოდი გარკვეული მატრიცის სახით.

ამრიგად, შეიძლება მტკიცება იმისა, რომ „ქართული“ მათემატიკური ქიმია თითქმის 40 წლისაა. საქართველოში ამ მეცნიერების განვითარება ძირითადად დაკავშირებულია სამი მკვლევარის სახელთან: პროფ. მიხეილ გვერდწითელი და მისი ორი მოწაფე - ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორები გია გამზიანი და გიორგი ლეკიშვილი. გარდა ამისა, ამ ჯგუფში შედიან: რობერტ დევდარიანი, აკაკი გახოკიძე, გიორგი ჩაჩავა, ილია გვერდწითელი, ეკატერინე ცაგურია, ნუნუ ცეცაძე და ზოგიერთი სხვა ახალგაზრდა მკვლევარი. ამ მიმართულებით, ცალკე აღსანიშნავია ტექნიკური უნივერსიტეტის თანამშრომლების, პროფ., ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის, თენგიზ წივწივაძის და პროფ., ქიმიის აკადემიური დოქტორის, მალხაზ ბერეჟიანის ფუნდამენტური გამოკვლევები.

მათემატიკური ქიმიის ქართველ სპეციალისტებს გამოქვეყნებული აქვთ: სამასზე მეტი სამეცნიერო სტატია ქართულ, ყოფილ საბჭოთა და უცხოურ პრესტიჟულ სამეცნიერო პერიოდიკაში; სამ ათეულამდე მონოგრაფია ქართულ, რუსულ და ინგლისურ ენებზე; სისტემატიურად მონაწილეობენ რესპუბლიკურ და საერთაშორისო კონფერენციებზე (50-მდე თეზისი); შედგენილია კომპიუტერული პროგრამა „ლესი“ – (პროფ. გ. გამზიანი), რომლის მიზანია ორგანულ ნაერთთა სტრუქტურის გენერაცია და პმრ - სპექტრების კომპიუტერულად დამუშავება და სხვ.

საქართველოში მათემატიკური ქიმიის განვითარებას და მისი ძირითადი მიღწევების მიმოხილვას ეძღვნება წინამდებარე საკვალიფიკაციო ნაშრომი.

1 . ლიტერატურის მიმოხილვა

ქართველ მათემატიკოს-ქიმიკოსთა კვლევები ძირითადად სამი მიმართულებით მიმდინარეობს:

1. იზომერების გენერაცია და კლასიფიკაცია;
2. ტოპოლოგიური ინდექსების შემუშავება და მათ ბაზაზე კორელაციური განტოლებების „აღნაგობა- თვისებები“ კონსტრუირება და გამოკვლევა;
3. სხვადასხვა ტიპის ქიმიური რეაქციის ალგებრულ-ქიმიური გამოკვლევა- დახასიათება.

შესაბამისად, ლიტერატურის მიმოხილვაში, ძირითადად, ეს საკითხებია განხილული. ამასთან, აქცენტი გაკეთებულია ქართველ მკვლევართა მიერ მიღებული შედეგების წარმოჩენაზე.

1. 1. იზომერების გენერაცია და კლასიფიკაცია

ტერმინი „იზომერი“ პირველად 1830 წ. გამოიყენა იაკობ ბერცელიუსმა ისეთი ნაერთების აღსანიშნავად, რომელთაც გააჩნიათ ერთნაირი ქიმიური შედგენილობა და მოლეკულური მასა, მაგრამ იჩენენ განსხვავებულ თვისებებს [10-24].

საინტერესოა, რომ ინტუიციურ მოსაზრებას იზომერიის თაობაზე გაცილებით ხანგრძლივი ისტორია გააჩნია - მას ჯერ კიდევ ანტიკურ ფილოსოფიაში ვხვდებით. არისტოტელე თავის „მეტაფიზიკაში“ წერს: „ლეიკიპოსი და დემოკრიტე ამტკიცებენ, რომ ატომთა განსხვავებაა სხვა სხვაობათა მიზეზი. ისინი მიუთითებენ სამ ასეთ სხვაობას: მოხაზულობა, მიმდევრობა და მდებარეობა. კერძოდ, α განსხვავდება β -საგან მოხაზულობით; α β განსხვავდება β α - საგან მიმდევრობით; α განსხვავდება ϵ -საგან მდებარეობით.“

იზომერიის მოვლენის ლოგიკური ინტერპრეტაცია პირველად შესაძლებელი გახდა ორგანულ ნაერთთა აღნაგობის თეორიის ფარგლებში, რომლის ფუნდამენტური დებულებები მიხეილ ბუტლეროვმა 1861 წ. ჩამოაყალიბა. უფრო მეტიც, ამ თეორიის ერთ-ერთი დებულება -

„ნივთიერებათა თვისებები დამოკიდებულია არა მარტო იმაზე, თუ რომელი ელემენტის ატომები და რა რაოდენობით შედის მოლეკულის შედგენილობაში, არამედ ატომთა შეერთების მიმდევრობაზეც“, რომელიც უშუალოდ პროგნოზირებს იზომერიის მოვლენას.

მოგვყავს იზომერიის კლასიკური და ორი თანამედროვე განმარტება. ის ფაქტი, რომ ახალ დეფინიციებში ფიგურირებს ორი ფუნდამენტური ფიზიკური სიდიდე - ენერგია და დრო, ცალსახად მიგვანიშნებს, რომ იზომერიის ცნებამ ფიზიკური „ელფერიც“ შეიძინა.

იზომერები ეწოდება ნივთიერებებს, რომლებსაც გააჩნიათ ერთნაირი მოლეკულური ფორმულა, მაგრამ სხვადასხვა აღნაგობა და, აქედან გამომდინარე, სხვადასხვა თვისებები (კლასიკური), ან **იზომერები** ეწოდება ერთნაირი მოლეკულური შედგენილობის მქონე ნივთიერებებს, თუ მათი გამყოფი ენერგეტიკული ბარიერი (ერთმანეთში გადასვლის აქტივაციის ენერგია) RT სითბურ ქვანტზე მეტია (ილიელი), ან **იზომერები** ეწოდება იდენტური მოლეკულური ფორმულების მქონე ინიდივიდუალურ ქიმიურ ნაერთებს, რომლებსაც განსხვავებული აქვთ ესა თუ ის ფიზიკურ-ქიმიური თვისება და რომლებიც სტაბილურნი არიან დროის უფრო ხანგრძლივ ინტერვალში, ვიდრე შესასწავლი თვისების გაზომვისთვისაა საჭირო (რუვრი).

ცხრილი 1 . ორგანულ ნაერთებში იზომერიის ძირითადი ტიპების კლასიფიკაცია

I. სტაბილური იზომერები	
1. სტრუქტურული იზომერია	1. 1. ჩონჩხის იზომერია; 1.2. ფუნქციური ჯგუფების მდებარეობის იზომერია; 1.3. ფუნქციური ჯგუფების ურთიერთმდებარეობის იზომერია; 1.4. ფუნქციური ჯგუფის იზომერია.
2. სტერეო - იზომერია	2.1. ოპტიკური იზომერია; 2.2. გეომეტრიული იზომერია.
II . ლაბილური იზომერები	
1. ბრუნვითი იზომერია; 2. ინვერსიული იზომერია.	

ამჟამად ცნობილია იზომერიის სამ ათეულამდე ტიპი - შესაბამისად, არსებობს მათი სხვადასხვა კლასიფიკაცია. ერთ-ერთი მათგანი (რომელიც იენენმა შეიმუშავა) მოყვანილია ცხრილი 1.

დღეისათვის იზომერიის მოვლენა ინტენსიურად შეისწავლება როგორც ექსპერიმენტულად (კვლევის უახლესი ფიზიკურ-ქიმიური მეთოდებით), ასევე თეორიულ ასპექტში (მოლეკულური მექანიკა, ქვანტური ქიმია, მათემატიკური ქიმია). ეჭვგარეშეა, რომ ეს კვლევები ქიმიას არაერთი საინტერესო აღმოჩენით გაამდიდრებენ.

ორგანულ ნაერთთა ჰომოლოგიურ რიგებში სტრუქტურული იზომერების რიცხვის განსაზღვრა საუკუნეზე მეტია იპყრობს ქიმიკოსებისა და მათემატიკოსების ყურადღებას და წარმოადგენს სტრუქტურული ქიმიის ბოლომდე გადაუჭრელ ამოცანას.

მიღებულია რამდენიმე ემპირიული სტრუქტურული ფორმულა, რომლის საშუალებითაც შეიძლება სტრუქტურული იზომერების რიცხვის დადგენა ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში - C_nH_{2n+2} . ერთ-ერთი ასეთი ფორმულაა:

$$N(n) = 1 + [2^{n-4}] + [2^{n-8}] + 6 [2^{n-10}] \quad 1$$

სადაც კვადრატული ფრჩხილების სიმბოლო აღნიშნავს რიცხვის მთელ ნაწილს. ჰომოლოგიური რიგის ნებისმიერი წევრისთვის იზომერების რიცხვის განსაზღვრა შეიძლება რეკურენტული ფორმულების საშუალებით, კომპიუტერის გამოყენებით.

ბოლო წლებში დიდი მნიშვნელობა შეიძინა იზომერების გაერთიანებამ ცალკეულ ჯგუფებში (უფრო ტევად სიმრავლეებად). ეს ამოცანა თუნდაც იმითაა მნიშვნელოვანი, რომ n -ის ზრდასთან ერთად იზომერების რიცხვი კოლოსალურად იზრდება (ე.წ. „კომბინატორული აფეთქება“). ასე, მაგალითად, ჰექსანის - $C_{100}H_{202}$ იზომერების რიცხვი $7 \cdot 10^{38}$ -ზე მეტია.

ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში შემუშავებულია პროფ. მ. გვერდწითელის და გ. გამზიანის მიერ იზომერების კლასიფიკაცია მათში პირველადი - A (CH_3-), მეორეული-B ($-CH_2-$), მესამეული-C ($-\overset{\cdot}{C}H$) და მეოთხეული-D ($-\overset{\cdot}{C}-$) ნახშირბადატომების რიცხვის მიხედვით. ამ მიდგომის საფუძველზე ნებისმიერი ალკანი შეიძლება ჩაიწეროს როგორც:

$$A_a B_b C_c D_d \quad 2$$

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

$$a + b + c + d = n \quad 3$$

$$3a + 2b + c = 2n+2 \quad 4$$

(2) გამოსახულების ოჯახი ეწოდება.

დადგენილია, რომ ოჯახების საერთო რიცხვი Z(n) მოცემული n-ისათვის ტოლია - ლუწი n-სათვის:

$$Z(n) = \frac{1}{2} \{n(R + S + 1) - 3R (R + 1) - S(3S + 1)\} \quad 5$$

სადაც:

$$R = [(n-2)/6] \quad 6$$

$$S = [n/6] \quad 7$$

კენტი n-სათვის:

$$Z(n) = \frac{1}{2} \{ n (R + S + 1) - 3R(R+1) - R - 3S^2 - 1 \} \quad 8$$

სადაც:

$$R = [(n-3)/6] \quad 9$$

$$S = [(n+1)/6] \quad 10$$

ცხრილი 2-ში მოყვანილია იზომერების, ოჯახების და ზეოჯახების რიცხვი C₃H₈-დან C₁₀H₂₂-მდე.

ცხრილი 2. იზომერების, ოჯახების და ზეოჯახების რიცხვი C₃H₈-დან C₁₀H₂₂- მდე

C _n H _{2n+2}	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄	C ₇ H ₁₆	C ₈ H ₁₈	C ₉ H ₂₀	C ₁₀ H ₂₂
იზომერების რიცხვი	1	2	3	5	9	18	35	75
ოჯახების რიცხვი	1	2	3	4	5	7	8	10
ზეოჯახების რიცხვი	1	2	3	4	4	6	6	6

(5) და (8) ფორმულების გამოყენებით შესაძლებელია ოჯახების ჯამური რიცხვის განსაზღვრა. ამავე დროს არსებობს მეთოდი, რომელიც საშუალებას იძლევა განვსაზღვროთ როგორც ოჯახების ჯამური რიცხვი, ასევე ტიპებიც. ამ მეთოდის არსი მდგომარეობს (2n+2) წყალბადატომის

განაწილების ყველა ვარიანტის ჩამოთვლაში n -ნახშირბადატომზე. ასე, მაგალითად, ჰეპტანისთვის -C₇H₁₆ იქნება:

C	1	2	3	4	5	6	7	
H	3	3	3	3	3	1	0	A ₅ CD
	3	3	3	3	2	2	0	A ₄ B ₂ D
	3	3	3	3	2	1	1	A ₄ BC ₂
	3	3	3	2	2	2	1	A ₃ B ₃ C
	3	3	2	2	2	2	2	A ₂ B ₅

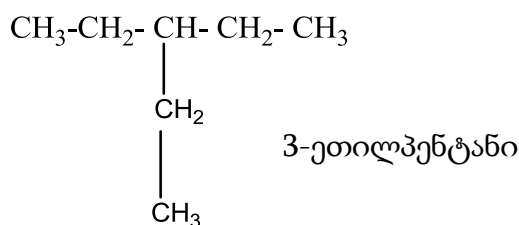
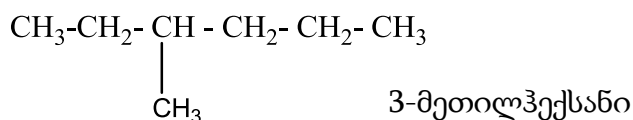
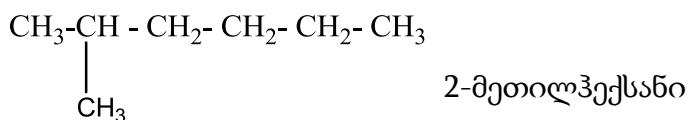
11

ცხრილი 3-ში მოყვანილია ოჯახების ტიპი C₃H₈ -დან C₈H₁₈- მდე. ფრჩხილებში მოცემულია იზომერების ის რიცხვი, რომელთაც მოცემული ოჯახი შეიცავს.

ცხრილი 3. ოჯახთა ტიპები C₃H₈-დან C₈H₁₈-მდე

C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄	C ₇ H ₁₆	C ₈ H ₁₈
A ₂ B (1)	A ₂ B ₂ (1) A ₃ C (1)	A ₂ B ₃ (1) A ₃ BC (1) A ₄ D (1)	A ₂ B ₄ (1) A ₃ B ₂ C (2) A ₄ BD (1) A ₄ C ₂ (1)	A ₂ B ₅ (1) A ₃ B ₃ C (3) A ₄ B ₂ D (2) A ₄ BC ₂ (2) A ₅ CD (1)	A ₂ B ₆ (1) A ₃ B ₄ C (4) A ₄ B ₃ D (3) A ₄ B ₂ C ₂ (5) A ₅ BCD (3) A ₅ C ₃ (1) A ₆ D ₂ (1)

როგორც ცხრილი 3-დან ჩანს, ზოგიერთი ოჯახი აერთიანებს მხოლოდ ერთ იზომერს, ზოგიერთი - ერთზე მეტს. ასე, მაგალითად, A₃B₃C ოჯახი



აერთიანებს ზემოთ აღნიშნულ სამ იზომერს.

მიუხედავად იმისა, რომ ოჯახების რიცხვი n -ის მაღალი მნიშვნელობებისათვის შეუდარებლად მცირეა იზომერების რიცხვზე (ასე, მაგალითად, $C_{100}H_{202}$ -ს გააჩნია სულ 850 ოჯახი), ოჯახების რიცხვი მაინც შემოსაზღვრავი სიმრავლეა. აღმოჩნდა, რომ ოჯახების გაერთიანება შესაძლებელია უფრო ტევად და შემოსაზღვრულ სიმრავლეებად - ზეოჯახებად. სულ არსებობს 7 ზეოჯახი:

AB, AC, AD, ABC, ABD, ACD და ABCD.

(ინდივიდუალურ ზეოჯახს წარმოქმნის C_2H_6 (A-ტიპის) და CH_4).

ცხრილი 4. ზეოჯახების ტიპი C_3H_8 -დან $C_{15}H_{32}$ -მდე

n	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
AB	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
AC	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-
AD	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-
ACD	-	-	-	-	+	-	+	+	+	+	+	+	+
ABD	-	-	-	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ABC	-	-	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ABCD	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	+	+	+

ცხრილი 4-ში მოყვანილია ზეოჯახების ტიპი, რომლებიც რეალიზდება პროპანიდან პენტადეკანამდე. („+“ ნიშნავს, რომ ალკანი შეიცავს მოცემულ ზეოჯახს).

როგორც ვხედავთ, $n \geq 9$ -სათვის ზეოჯახების მინიმალური რიცხვი ხუთის ტოლია. ამის მიზეზია ის, რომ ზოგიერთი ჰომოლოგისათვის ქრებიან ან AC, ან AD ზეოჯახები ან ორივე ერთად.

აღმოჩნდა, რომ ალკანთა ჰომოლოგიური რიგის წარმომადგენლები, რომლებიც შეიცავს შვიდივე ზეოჯახს, ემორჩილება ფორმულას:

$$n = 6K + 2 \qquad 12$$

სადაც, $K \geq 2$.

ამგვარად, ყველა ზეოჯახს შეიცავს : ტეტრადეკანი - $C_{14}H_{30}$, ეიკოზანი - $C_{20}H_{42}$ და ა.შ.

ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში ოჯახების ცნება და მათი განსაზღვრის მეთოდის შეიძლება განზოგადებული იყოს ორგანულ ნაერთთა სხვა კლასებზეც. განვიხილოთ ისეთი ორგანული ნაერთების ოჯახების გენერაციის მეთოდის, რომლებიც შეიცავს ნახშირბადს, წყალბადს და ჟანგბადს. ზოგადად, მათი მოლეკულური ფორმულა შეიძლება ჩაიწეროს როგორც:



შემოტანილია შემდეგი აღნიშვნები ატომური ფრაგმენტებისთვის:

CH ₃ -	A	≡CH	K
-CH ₂ -	B		
$\begin{array}{c} \\ -CH \\ \end{array}$	D	≡C—H	L
$\begin{array}{c} \\ -C- \\ \end{array}$	E	—OH	U
CH ₂	F		
≡CH—	G	—O—	V
		≡O	W
≡C≡	I		

ამ აღნიშვნების გამოყენებით C_xH_yO_z შეიძლება ჩაიწეროს ოჯახის სახით:



სადაც: a, b, c, d, e, f, g, I, j, k, ℓ, u, v, w -აღნიშნავს A, B, D, E, F, G, I, J, K, L, U, V, W ფრაგმენტების რაოდენობას.

ნაერთში შემავალი ციკლების, ორმაგი და სამმაგი ბმების რაოდენობის განსაზღვრისათვის გამოიყენება ფორმულები:

ციკლების რიცხვი Δ ტოლია:

$$\Delta = x - y/2 - \pi - 2\lambda + 1 \quad 16$$

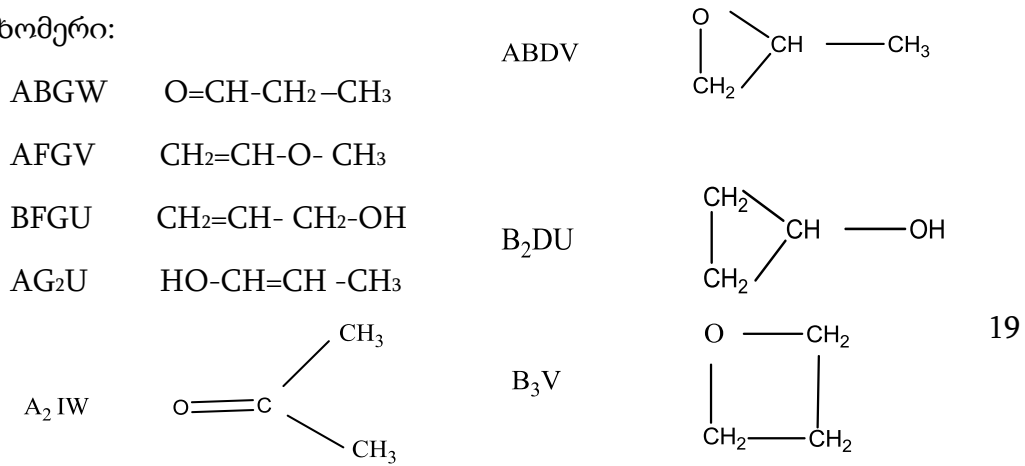
ორმაგი ბმების რიცხვი π ტოლია:

$$\pi = \frac{1}{2} (f + g + i + 5j + w) \quad 17$$

სამმაგი ბმების რიცხვი λ ტოლია:

$$\lambda = \frac{1}{2} (k + \ell) \quad 18$$

ასე, მაგალითად, C_3H_6O მოლეკულური ფორმულის მქონე ნაერთი შეიცავს ცხრა ოჯახს, რომელთაგან თითოეულში შედის ერთი სტრუქტურული იზომერი:

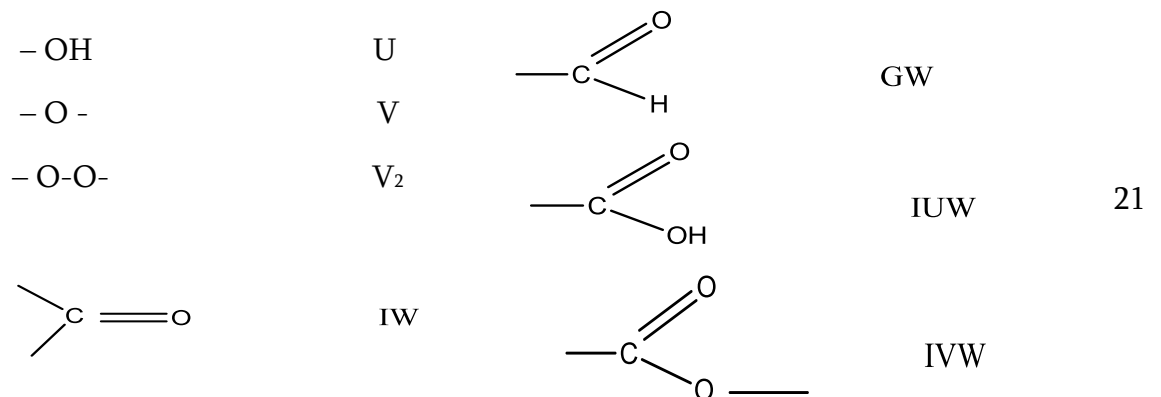


19

ალკანების ჰომოლოგიური რიგის ანალოგიურად არსებობს ოჯახები, რომლებიც აერთიანებს რამდენიმე სტრუქტურულ იზომერს. მაგალითად, $C_3H_8O_2$ მოლეკულური ფორმულის მქონე ნაერთი შეიცავს AB₂UV ოჯახს, რომელიც აერთიანებს სამ სტრუქტურულ იზომერს:



ოჯახის სტრუქტურის ანალიზი საშუალებას იძლევა დაფიქსირდეს ამა თუ იმ ფუნქციური ჯგუფის არსებობა:



21

ამ მიდგომის გამოყენებით მარტივდება მოლეკულური ფორმულიდან სტრუქტურულ ფორმულაზე გადასვლის პროცედურა.

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

დღესდღეობით პრობლემის - „სტრუქტურა-თვისება“ - გადასაჭრელად [25] ხშირად მიმართავენ შედარებით მარტივი, ფორმალური ხასიათის მეთოდების შემუშავებას, რომელთაც საფუძვლად უძევს მოლეკულების აღნაგობის ალგებრულად გამოსახვა. მოლეკულების სტრუქტურებისადმი ასეთი ე.წ. ტოპოლოგიური მიდგომის განხორციელებისას, მხედველობაში მიიღება მხოლოდ ატომთა ტიპები და მათ შორის არსებული ბმის ჯერადობა. რაც შეეხება მოლეკულის მეტრიკულ მახასიათებლებს - ბმის სიგრძეს, ბმებს შორის კუთხეებს და სხვა - ისინი უგულებელყოფილნი არიან.

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

$$P = k_0 + k_1 T_1 + k_2 T_2 + \dots + k_N T_N \quad 22$$

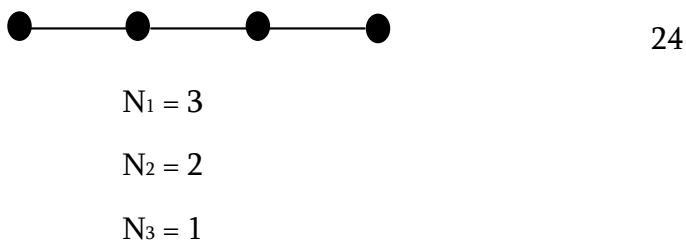
სადაც k_i - გარკვეული კოეფიციენტებია.

ქიმიური გრაფის ტოპოლოგიური სტრუქტურის ამსახველი პირველი მათემატიკური ინდექსი შემუშავებული იყო ვინერის მიერ 1947 წელს. ვინერის ინდექსი - $W(G)$ წარმოადგენს რიცხვს, რომელიც ალკანის

ნახშირბადული ჩონჩხის G ქიმიურ გრაფში ყველა წვეროთა წყვილებს შორის არსებული მანძილის (ანუ ბმების რიცხვის) ჯამის ტოლია. იგი გამოითვლება ფორმულით:

$$w(G) = \sum_{i=1}^k iN_i \quad 23$$

სადაც N_i სიმბოლო i - მანძილით დაშორებულ წვეროთა წყვილების რიცხვს აღნიშნავს. ქვემო სქემაზე განხილულია $W(G)$ -ს გამოთვლის კონკრეტული მაგალითი n -ბუტანისთვის:



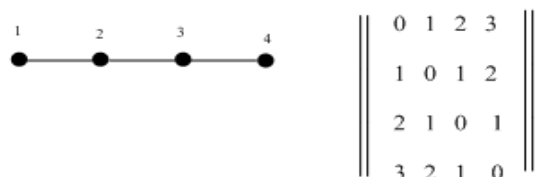
$$\sum_{i=1}^k iN_i = 1 \cdot 3 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 1 = 10 \quad 25$$

ვინერის მიერვე შემუშავებულია $W(G)$ -ს მონათესავე ინდექსი $P(G)$, რომელსაც მან პოლარობის რიცხვი უწოდა. $P(G)$ მხოლოდ სამის ტოლი მანძილით დაშორებულ წვეროთა წყვილებს აფიქსირებს. ვინერის ინდექსები საფუძვლად დაედო ალკანების დუდილის ტემპერატურის , წარმოქმნის სითბოს, მოლური მოცულობისა და მოლეკულური რეფრაქციის გამოთვლის ფორმულებს.

აღსანიშნავია, რომ ვინერის ინდექსი $W(G)$ თავდაპირველად არ იყო მათე-მატიკურად მკაცრად ფორმულირებული. ეს მოხერხდა მხოლოდ ხოსოიას მიერ. $W(G)$ ინდექსის ხელახალი ფორმულირების შემდეგ, რომლის საფუძველზეც განსაზღვრულ იქნა ნაერთის G გრაფის შესაბამისი დისტანციური მატრიციდან მისი გენერაციის მკაცრი მატემატიკური ალგორითმი.

დისტანციურ მატრიცაში არადიაგონალურ ელემენტებს G მოლეკულური გრაფის i და j წვეროებს შორის მანძილი წარმოადგენს, ხოლო დიაგონალურ ელემენტებს - ნოლები. ქვემო სქემაზე გამოსახულია n -ბუტანის

ნახშირბადული ჩონჩხის შესაბამისი G მოლეკულური გრაფის შესატყვისი დისტანციური მატრიცა:



26

ვინერის ინდექსი თავისი არსებობის მანძილზე, რამდენჯერმეა მოდიფიცირებული, ალტენბურგმა იგი პოლინომიალურ ფორმაში გარდაქმნა, ხოსოიამ ციკლური ტიპის ორგანულ ნაერთთა განხილვის საფუძველზე გააფართოვა მისი გამოყენების სპექტრი, ხოლო რუვრის მიერ შემოთავაზებული ინდექსი, როგორც მოგვიანებით გამოირკვა, ვინერის ინდექსის გაორმაგებულ სიდიდეს წარმოადგენდა.

დღესდღეისობით, მათემატიკურ ქიმიაში ტოპოლოგიური ინდექსების კონსტრუირება ძირითადად G გრაფის შესაბამისი დისტანციური და თანაზიარობის მატრიცების აქტიურ გამოყენებასთან არის დაკავშირებული. გავეცნოთ ამ ინდექსებს.

1. მანძილების ჯამის ინდექსი - $S(G)$, პირველად - ერთმანეთისაგან დამოკიდებულად - შემოთავაზებულია ბონჩევის და პოლანსკის მიერ. იგი განისაზღვრება როგორც $D(G)$ დისტანციური მატრიცის i -ურ სტრიქონში განლაგებული ელემენტების ჯამი:

$$S(G) = \sum_{i=1}^k d_{ij} \tag{27}$$

2. გასაშუალებული მანძილების ჯამით შეკავშირების ინდექსი - $J(G)$ კონსტრუირებულია ბალაბანის მიერ და განისაზღვრება როგორც:

$$J(G) = 2/(\mu + 1) \sum_{i,j} (U_{D,i} U_{D,j})^{-1/2} \tag{28}$$

სადაც μ - გრაფის ციკლომატიური რიცხვია (მოლეკულაში ციკლების რიცხვი), ხოლო $U_{D,i}$ და $U_{D,j}$ მანძილების ჯამი.

3. საშუალოკვადრატული მანძილების ინდექსი - $D^{(2)}(G)$ შემუშავებულია ბალახანისა და მოტოკის მიერ. იგი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$D^{(2)}(G) = \left[\frac{\sum_{d_i=1}^{d_i(\max)} q_i d_i^2}{\sum_{d_i=1}^{d_i(\max)} d_i^2} \right]^{1/2}$$

29

სადაც q_i - i -მანძილით დაშორებულ წვეროთა წყვილების რიცხვს აღნიშნავს.

4. წვეროთა შორის მანძილის ინდექსი - $VDI(G)$ შემოთავაზებულია ბონჩევის მიერ და განისაზღვრება როგორც :

$$VDI(G) = \sum_i (q'_i)^2$$

30

სადაც q'_i - დისტანციურ მატრიცაში j წვეროს შესაბამისი d_i ელემენტების განმეორებათა რიცხვს აღნიშნავს.

5. ხოსოიას ინდექსი - $Z(G)$ გამოსახება შემდეგი განტოლებით:

$$Z(G) = \sum_{k=2}^{[n/2]} P(G', k)$$

31

სადაც $P(G, k)$ - G გრაფში k არათანაბარი წიბოების ამორჩევის ყველა შესაძლო ვარიანტების რიცხვს უდრის; კვადრატული ფრჩხილები $n/2$ ნამდვილი რიცხვის მთელ ნაწილს აღნიშნავს.

6. მანძილების პოლინომი - $Z'(G)$ ასევე ხოსოიას მიერაა მოწოდებული. მას შემდეგი სახე გააჩნია :

$$Z'(G) = \sum_{p=0}^n |\alpha_p|$$

32

სადაც α_p - დისტანციური მატრიცის მახასიათებელი პოლინომის კოეფიციენტებს შეადგენს.

7. ვინერის ინდექსი - $W(G)$, განსაზღვრული დისტანციური მატრიცის ფარგლებში, ჩაიწერება როგორც:

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_i d_{ij}$$

33

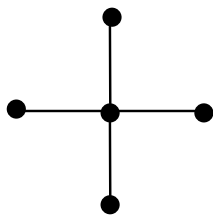
8. ვინერის მიერვე შემოტანილი პოლარობის რიცხვი - $P(G)$ ჩაიწერება როგორც:

$$P(G) = \frac{1}{2} \sum_i d_i \quad 34$$

9. ალტენბურგის პოლინომი ჩაიწერება როგორც:

$$J(G) = \sum_i \alpha_i q_i \quad 35$$

სადაც α_i ჩამოთვლის ინდექსის ცვლადს წარმოადგენს, ხოლო q_i - მანძილით დაშორებული წვეროთა წყვილების რიცხვია.



$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

36

თანაზიარობის მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია ნულები, არადიაგონალური „1“ ან „0“ : თუ შესაბამისი გრაფის ორი წვერო შეერთებულია (თანაზიარია) - „1“ , თუ არაა შეერთებული - „0“, ზემოთ მოყვანილია მოლეკულური გრაფი და მისი შესაბამისი თანაზიარობის მატრიცა.

თანაზიარობის მატრიცის საფუძველზე აგებულია არაერთი ტოპოლოგიური ინდექსი. ასეთი ინდექსებია:

1. პლატის ინდექსი - $F(G)$ განისაზღვრება, როგორც თითოეული ბმის თანაზიარი ბმების ჯამი. იგი რიცხობრივად G გრაფის წიბოთა ხარისხების ჯამის ტოლია:

$$F(G) = \sum_{f=1}^{f'} \text{dege}_f \quad 37$$

სადაც dege_f - f წიბოს თანაზიარ წიბოთა რიცხვს განსაზღვრავს, ხოლო f - G გრაფში წიბოების საერთო რიცხვს.

2. გორდონ - სკანტალბერის - $Y(G)$ 2-ის ტოლი მანძილით დაშორებულ წვეროთა წყვილების რიცხვის ტოლია:

$$Y(G) = \sum_i (P_2)_i \quad 38$$

3. რანდიჩის ინდექსი - $\chi(G)$ განისაზღვრება როგორც:

$$\chi(G) = \sum_{e,f} (U_i U_j)^{-1/2} \quad 39$$

U_i და U_j - გრაფის i და j წვეროების ხარისხებს წარმოადგენს. მოგვიანებით, რანდიჩის ინდექსი საფუძვლად დაედო ალკანების წარმოქმნის სითბოს - $\Delta H_{f,298}^{0f}$ მიახლოებით გამოთვლის კორელაციურ ფორმულას:

$$\Delta H_{f,298}^{0f} = 12\chi - 11n - 9 \quad 40$$

სადაც n ნახშირბადატომების რიცხვია.

4. სრული თანაზიარობის ინდექსი - $A'(G)$ შემოტანილია ბარტონის მიერ. იგი განისაზღვრება როგორც $A(G)$ თანაზიარობის მატრიცაში შემავალი ყველა ელემენტის ჯამი:

$$A'(G) = \sum_{i,i}^n \alpha \quad 41$$

აქვე აღვნიშნავთ, რომ ბარტონის ინდექსი ერთმანეთისგან ანსხვავებს მხოლოდ ციკლების სხვადასხვა რიცხვის შემცველ მოლეკულებს.

5. გრაფების წვეროთა ხარისხების ინვარიანტულ სიმრავლეზე აგებული ინდექსები - $M_1(G)$ და $M_2(G)$ კონსტრუირებულია რანდიჩისა და გუტმანის მიერ:

$$M_1(G) = \sum_{i=2}^n U_i \quad 42$$

$$M_2(G) = \sum_{ij} (U_i U_j) \quad 43$$

სადაც U_i და U_j - გრაფის i და j წვეროების ხარისხებს აღნიშნავს.

6. ქიმიური სტრუქტურების შედარებისა და მათი სისტემატიზაცია -

-დალაგების მიზნით რანდიჩისა და გუტმანის მიერ შემოტანილი შედარების კოდი - $V(G)$. ის განისაზღვრება როგორც :

$$V(G) = (V_1 V_2 \dots V_n) \quad 44$$

სადაც V_i G - გრაფის i -იური ხარისხის მქონე წვეროების რიცხვს აღნიშნავს, ხოლო n - წვეროების საერთო რიცხვს . რაც შეეხება შედარების ინდექსს - $M_3(G)$, იგი გამოითვლება ფორმულით:

$$M_3(G) = \sum_{i=1}^n V_i \quad 45$$

განხილულთა გარდა არსებობს სხვა ტოპოლოგიური ინდექსებიც. აგებული სრულიად განსხვავებულ მათემატიკურ ფუნდამენტზე.

მათემატიკური ქიმიის ქართული სკოლის მიერ შემუშავებულია რამდენიმე ახალი ტოპოლოგიური ინდექსი, რომელთა შორის უმნიშვნელოვანესია ოთხი ტოპოლოგიური ინდექსი.

პროფ. მ. გვერდწითელის მიერ შემუშავებული ოთხი ეფექტური ტოპოლოგიური ინდექსი, რომელიც აგებულია რნბ-, ქვაზი-რნბ-, ფსევდო-რნბ- და ეკ-მატრიცების ბაზაზე. ისინი წარმოადგენენ ამ მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობების ათობით ლოგარითმებს. დეტალურად განვიხილოთ ამ მატრიცების სტრუქტურა [26-36].

რნბ-მატრიცის (აბრევიატურა „რნბ“ ნიშნავს რიგობრივი n ომერი - ბმა) დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია - ქიმიურ ბმათა ჯერადობები. ზოგადად, სამატომიანი ABC მოლეკულის შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_A & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB} & Z_B & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC} & \Delta_{BC} & Z_C \end{vmatrix} \quad 46$$

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

და C, A და C ატომებს შორის. (46) მატრიცის დეტერმინანტია მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი - $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს.

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

ამ მიზეზით მოხდა რნბ-მატრიცის მოდერნიზაცია ქვაზი-რნბ-მატრიცად (რნბ). ეს უკანასკნელი საშუალებას იძლევა არა მარტო ადეკვატურად აისახოს კონკრეტული მოლეკულის სტრუქტურის სპეციფიკა, არამედ გამოთვლების შრომატევადობაც მნიშვნელოვნად შემცირდეს. ისიც უნდა აღინიშნოს, რომ ეს მიდგომა საშუალებას იძლევა მოლეკულა წარმოვაჩინოთ როგორც ძირითადი სტრუქტურული ფრაგმენტის („ჩონჩხის“), ჩამნაცვლებელისა და სარეაქციო ცენტრისაგან შემდგარი სისტემა, რაც ტრადიციული მიდგომაა ორგანულ ქიმიაში. ამგვარად, ფორმალურად, ქვაზი-რნბ-მატრიცას (46) სახე აქვს, ოღონდ ამ შემთხვევაში A, B და C წარმოადგენენ არა ინდივიდუალურ ქიმიურ ელემენტებს, არამედ მოლეკულის სტრუქტურულ ფრაგმენტებს. შესაბამისად, Z_A , Z_B და Z_C სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამებია:

$$\begin{aligned} Z_A &= \sum Z_a \\ Z_B &= \sum Z_b \\ Z_C &= \sum Z_c \end{aligned} \quad 47$$

ასე, მაგალითად, ალანინის $\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$ შესაბამისი რნბ-მატრიცა მეთე რანგისაა. თუ განვიხილავთ მოდელს:

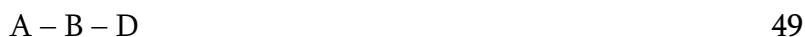


სადა: $\text{A} \equiv \text{NH}_2$, $\text{B} \equiv \text{CH}_2$, $\text{D} \equiv \text{COOH}$, შესაბამისი ქვაზი-რნბ-მატრიცის რანგი სამის ტოლი ხდება. (48) მოდელი ლოგიკურია ქიმიური თვალსაზრისითაც - ამინომმარმჟავა ამინო-ჯგუფის ($-\text{NH}_2$), CH_2 ფრაგმენტისა და კარბოქსილის ჯგუფის ($-\text{COOH}$) „ქიმიური“ ერთიანობაა.

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

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

მაგალითად, ქლორმმარმჟავა $\text{Cl-CH}_2\text{-COOH}$ შეიძლება წარმოდგენილი იყოს შემდეგი მოდელით:



სადაც: $\text{A} \equiv \text{Cl}$, $\text{B} \equiv \text{CH}_2$, $\text{D} \equiv \text{COOH}$.

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

$$\begin{vmatrix} \chi_A & \mu_{AB} & \mu_{AC} \\ \mu_{AB} & \chi_B & \mu_{BC} \\ \mu_{AC} & \mu_{BC} & \chi_C \end{vmatrix} \quad 50$$

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

AB_n ტიპის მოლეკულებისათვის (სადაც A - n-ვალენტოვანი ქიმიური ელემენტი, B - ერთვალენტოვანი) შემუშავებულია რნბ-მატრიცის ახალი მოდიფიცირებული სახეობა ჯანბ-მატრიცა (ჯგუფური ანბ-მატრიცა) [37]. იგი მეორე რანგისაა, მისი პირველი დიაგონალური ელემენტი Z_A , მეორე nZ_B (ამგვარად, n რაოდენობა ერთვალენტოვანი B ატომი განიხილება როგორც ერთი ფსევდო-ატომი); არადიაგონალური ელემენტებია n (ამგვარად, n რაოდენობა ერთმაგი ბმა განიხილება როგორც n-ჯერადი ფსევდო-ბმა). ჯანბ-მატრიცის სახეა:

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

ამგვარად, იგება კორელაციური განტოლებები:

$$P = \alpha_1 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + b_1 \quad 51$$

$$P = \alpha_2 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}^{\sim}) + b_2 \quad 52$$

$$P = \alpha_3 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}^{\overline{\sim}}) + b_3 \quad 53$$

$$P = \alpha_4 \lg(\Delta_{\text{გა}}) + b_4 \quad 54$$

$$P = \alpha_5 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + b_5 \quad 55$$

სადაც : P - მოლეკულის ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრია ($T_{\text{ლ}}, T_{\text{დუ}}, d_4^{20}, n_D^{20}, \Delta G, \Delta H, \Delta S$ და სხვ); $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, b_1, b_2, b_3, b_4, b_5$ რიცხვებია. (51) – (55) განტოლების კონსტრუირება ხდება კომპიუტერზე , უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით. მათი სიზუსტე ხასიათდება ე.წ. r კორელაციის კოეფიციენტით:

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

ჯაფემ შემოიტანა კორელაციის სიზუსტის კრიტერიუმები:

$r = 1$ იდეალური კორელაცია

$r > 0,99$ ბრწყინვალე კორელაცია

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

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

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

Cr(II) ჰალოგენიდების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [38].

Cr (II) ჰალოგენიდების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც : X = F, Cl, Br, I .

შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} 24 & 1 & 1 \\ 1 & Z_X & 0 \\ 1 & 0 & Z_X \end{vmatrix}$$

57

სადაც : 24 ქრომის რიგობრივი ნომერია.

ცხრილი 5-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ -ს და $T_{\text{დულ.}}$ მნიშვნელობები CrX_2 -თვის. კომპიუტერზე აგებულია $T_{\text{დულ.}} - \lg(\Delta_{\text{რნბ}})$, რომელსაც გააჩნია სახე:

$$T_{\text{დულ.}} = -369,0 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 3030,0 \quad 58$$

CrBr_2 -თვის დუდილის ტემპერატურა პროფ. მ. გვერდწითელისა და გ. ჩაჩავას მიერ გამოთვლილია თეორიულად (ინტერპოლაციით) (58) ფორმულის საფუძველზე (მოცემულია ფრჩხილებში).

კორელაციის r კოეფიციენტი ტოლია $r = 0,983$. ამრიგად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 5. ქრომ(II)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და დუდილის ტემპერატურების მნიშვნელობები

CrX_2	CrF_2	CrCl_2	CrBr_2	CrI_2
$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$	3,28	3,65	4,47	4,83
$T_{\text{დულ.}}, ^\circ\text{C}$	1820	1330	(1281)	1248

P(III) ჰალოგენიდების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [39].

P (III) ჰალოგენიდების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც : $X = \text{F, Cl, Br, I}$.

შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} 15 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & Z_x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & Z_x & 0 \\ 1 & 0 & 0 & Z_x \end{vmatrix}$$

60

სადაც : 15 ფოსფორის რიგობრივი ნომერია.

პროფ. მ. გვერდწითელის და ნ. კუპატაძის მიერ გამოთვლილი და ცხრილში 6 მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ -ს, $T_{\text{ლლ.}}$ და $T_{\text{დულ.}}$ მნიშვნელობები PX_3 -თვის.

ცხრილი 6. ფოსფორ(III)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, ლღობის და დუდილის ტემპერატურების მნიშვნელობები

PX_3	$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$	$T_{\text{ლლ.}} \text{ } ^\circ\text{C}$	$T_{\text{დულ.}} \text{ } ^\circ\text{C}$
PF_3	4,04	-160	-101
PCl_3	4,87	-92	-74,5
PBr_3	5,81	-40	172
PI_3	6,35	61	(256)

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$T_{\text{ლლ.}} = 67,8 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 433,9 \quad 61$$

$$T_{\text{დულ.}} = 15,48 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 726,4 \quad 62$$

PI_3 -თვის დუდილის ტემპერატურა გამოთვლილია თეორიულად (ექსტრაპოლაციით) (62) ფორმულის საფუძველზე (მოცემულია ფრჩხილებში).

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია 0,984 და 0,985. ამრიგად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ვერცხლის (I)-ის ჰალოგენიდების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [40]

ვერცხლის ჰალოგენიდების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც : $X \equiv \text{F, Cl, Br, I}$.

შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} 47 & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad 64$$

სადაც : 47 ვერცხლის რიგობრივი ნომერია.

ცხრილი 7-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{658})$, ΔH^0_{298} , ΔS^0_{298} , ΔG^0_{298} ვერცხლის ჰალოგენიდებისათვის, რომელსაც იკვლევდნენ პროფ. მ. გვერდწითელი, კ. გიორგაძე, მ. რუსია .

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\Delta H^0_{298} = 31,86 \lg(\Delta_{658}) - 123,12 \quad 65$$

$$\Delta S^0_{298} = 9,26 \lg(\Delta_{658}) - 3,88 \quad 66$$

$$\Delta G^0_{298} = 20,66 \lg(\Delta_{658}) - 86,12 \quad 67$$

r კორელაციის კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,986; 0,989 და 0,987.

ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 7. ვერცხლის (I)-ის ჰალოგენიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, წარმოქმნის ენტალპიის, სტანდარტული ენტროპიის და ჯიბსის პოტენციალის მნიშვნელობები

Ag X	$\lg(\Delta_{658})$	ΔH^0_{298} , კკალ/მოლი	ΔS^0_{298} , ე.ე.	ΔG^0_{298} , კკალ/მოლი
Ag F	2,63	-49,2	20,00	-44,91
Ag Cl	2,90	-30,73	22,97	-26,25
Ag Br	3,22	-24,96	25,6	-23,24
Ag I	3,40	-23,80	27,6	-21,86

ციკლოალკანების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [41-45].

ცხრილი 8. ჩაუნაცვლებელი ციკლოალკანებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, წარმოქმნის ენტალპიის და დუღილის ტემპერატურის მნიშვნელობები

ციკლოალკანი	$\lg(\Delta_{658})$	ΔH^0_{298} , კკალ/მოლი	T _{დღლ.} °C
C ₄ H ₈	2,28	2743,9	13
C ₅ H ₁₀	2,87	3320,0	49,3
C ₆ H ₁₂	3,43	3951,8	80,8
C ₇ H ₁₄	4,00	4653,9	119
C ₈ H ₁₆	4,58	5310,3	149
C ₉ H ₁₈	5,15	4979,8	178
C ₁₀ H ₂₀	5,72	6635,8	201

პროფ. მ გვერდწითელი, გ ჩაჩავას და ლ. ლაპერაშვილის მიერ შესწავლილია ჩაუნაცვლებელი ციკლოალკანები ე.ი. ისეთი ციკლოალკანები, რომელთა სტრუქტურა ზოგადად ასე შეიძლება ჩაიწეროს $(CH_2)_n$, $n \geq 4$.

ცხრილი 8-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{რნბ})$, ΔH^0_{298} და $T_{დულ.}$ ამ ნაერთებისათვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\Delta H^0_{298} = 1146,5 \lg(\Delta_{რნბ}) + 62,69 \quad 68$$

$$T_{დულ.} = 55,57 \lg(\Delta_{რნბ}) - 109,68 \quad 69$$

კორელაციის კოეფიციენტი ორივე შემთხვევაში 0,999-ს ტოლია. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები ბრწყინვალეა.

ჰალოგენწყალბადების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [46-48].

ცხრილი 9 . ჰალოგენწყალბადებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის და აორთქლების სითბო

ჰალოგენწყალბადი	$\Delta_{რნბ}$	წარმოქმნის სითბო (კკალ/მოლი)	აორთქლების სითბო (კკალ/მოლი)
HF	8	-271,10	7,8
HCl	16	-92,31	16,2
HBr	34	-36,54	17,6
HI	52	-26,36	19,8

თუ ჰალოგენწყალბადის მოლეკულას აღვნიშნავს HX-ით (X შეესაბამება ფტორს, ქლორს, ბრომს ან იოდს), შესაბამის რნბ-მატრიცას და მის გამოსათვლელ დეტერმინანტს ექნებათ სახე:

$$\begin{matrix} 1 & 2 \\ H & -X \end{matrix} \quad \begin{vmatrix} Z_X & I \\ I & Z_H \end{vmatrix} \quad 70$$

$$\Delta_{რნბ} = Z_X - I \quad 71$$

აღმოჩნდა, რომ ჰალოგენწყალბადების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრი იცვლება $\Delta_{რნბ}$ -ს მნიშვნელობების სიმბატურად (ცხრილი 9).

V ჯგუფის მთავარი ქვეჯგუფის ელემენტების ჰიდრიდების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [49]

დადგენილია, რომ $\Delta_{\text{რნზ}}$ -ს მნიშვნელობა იცვლება V ჯგუფის მთავარი ქვეჯგუფის ელემენტთან ჰიდრიდების სიმკვრივის, სტანდარტული ენთალპიის, ენტროპიისა და ჯიბსის პოტენციალის სიმბატურად (ცხრილი 10).

ცხრილი 10. V ჯგუფის მთავარი ქვეჯგუფის ელემენტთან ჰიდრიდებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, სიმკვრივის, სტანდარტული ენთალპიის, ენტროპიისა და ჯიბსის პოტენციალის მნიშვნელობები

ნაერთი	$\Delta_{\text{რნზ}}$	სითხის სიმკვრივე (დუღილის ტემპერატურაზე)	ΔH_{298}^0 (კკალ/მოლი)	ΔG_{298}^0 (კკალ/მოლი)	ΔS_{298}^0 (კკალ/(გრად. მოლი))
NH ₃	4	0,681	-11,02	-3,94	45,97
PH ₃	12	0,765	+1,3	+3,2	50,22
AsH ₃	30	1,621	+15,98	+16,47	53,22
SbH ₃	48	2,204	+34,681	+35,32	55,62

კობალტის (II) ჰალოგენიდების შესწავლა რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [50-51].

ცხრილ 11-ში მოყვანილია CoX₂-ის ლღობისა და დუღილის ტემპერატურები, სითბოტევადობები, წარმოქმნის ენთალპიები და $\lg(\Delta_{\text{რნზ}})$ -მნიშვნელობები.

ცხრილი 11. კობალტის (II) ჰალოგენიდების ტოპოლოგიური ინდექსების, ლღობისა და დუღილის ტემპერატურები, სითბოტევადობები, წარმოქმნის ენთალპიები

ნაერთი	T _{ლღ} (°C)	T _{დღ} , (°C)	C _p ⁰ ,	$\Delta H_{\text{წარმ.}}^0$	$\lg(\Delta_{\text{რნზ}})$
CoF ₂	1130	1740	68,78	-665,7	3,3
CoCl ₂	740	1050	78,49	-310,0	3,9
CoBr ₂	678	-	79,66	-216,0	4,5
CoI ₂	516	760	-	-85,8	4,9

კომპიუტერზე, უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$T_{\text{ლღ}} = 360,69 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 2265,10$$

$$T_{\text{დულ.}} = 594,59 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 3582,74 \quad 73$$

$$C_p^0 = +9,04 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 40,26 \quad 74$$

$$\Delta H_{\text{წარმ.}}^0 = 348,97 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) - 1769,78 \quad 75$$

კორელაციის r კოეფიციენტის მნიშვნელობები შესაბამისად, ტოლია: 0,946; 0,924; 0,939; 0,949. როგორც ვხედავთ, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია. ამგვარად, $\lg(\Delta_{\text{რნზ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს მოცემულ სისტემაში "აღნაგობა-თვისება" კორელაციის გამოსავლენად.

ტუტე ლითონების ჰალოგენიდების შესწავლა რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [52-58].

ცხრილ 12-ში მოცემულია ტუტე ლითონების ჰალოგენიდების შესაბამისი კრისტალური მესრების ენერგიები და რნზ - მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები.

კომპიუტერზე, უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, აგებულია კორელაციური განტოლებები; ტუტე ლითონების ფტორიდებისათვის, ქლორიდებისათვის, ბრომიდებისა და იოდიდებისათვის:

$$E = - 53,32 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 318,48 \quad 76$$

$$E = - 33,43 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 258,40 \quad 77$$

$$E = - 31,95 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 255,40 \quad 78$$

$$E = - 28,24 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) + 240,40 \quad 79$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია: 0,959; 0,970; 0,971; 0,978. ამგვარად, ოთხივე შემთხვევაში - ჯაფეს კრიტერიუმით - ადგილი აქვს დამაკმაყოფილებელ კორელაციას. აქედან გამომდინარე შეიძლება დავასკვნათ, რომ $\lg(\Delta_{\text{რნზ}})$ წარმოადგენს ტოპოლოგიურ ინდექსს მოცემულ სისტემაში "აღნაგობა-თვისებები" კორელაციის გამოსავლენად.

შემუშავებულია ბინარული იონური ნაერთების კრისტალური სტრუქტურების მათემატიკურად მოდელირება - დახასიათების მეთოდი, რომელიც აგებულია ე.წ. მახასიათებელი ვექტორის გამოყენებაზე.

მახასიათებელი ვექტორი შედგება რნზ-მატრიცის დეტერმინანტისაგან და თითოეული იონის მახასიათებლისაგან (d - ელექტრონების რაოდენობა

მეტალსა და არამეტალში, მეტალისა და არამეტალის ჯგუფის და რიგობრივი ნომრები). შესწავლილია 20 ბინარული ნაერთი, რომელთა მონაცემების დამუშავება ჩატარდა მთავარი კომპონენტის ანალიზის მეთოდით.

ცხრილი 12. ტუტე ლითონების ჰალოგენიდების შესაბამისი ტოპოლოგიური ინდექსი და კრისტალური მესრის ენერგიები

ნაერთი	E (კკალ/მოლი)	$\Delta_{რ68}$	ნაერთი	E (კკალ/მოლი)	$\Delta_{რ68}$
LiF	242,8	26	LiBr	191,0	104
NaF	216,6	98	NaBr	175,5	384
KF	191,8	170	KBr	160,7	664
RbF	184,6	332	RbBr	157,1	1294
CsF	176,6	495	CsBr	151,2	1924
FrF	(163,9)	783	FrBr	(144,1)	3095
LiCl	201,7	50	Lil	178,4	158
NaCl	183,9	186	NaI	164,8	582
KCl	168,3	322	KI	151,8	1006
RbCl	162,8	628	RbI	147,0	1960
CsCl	157,2	934	CsI	143,7	2914
FrCl	(152,4)	1479	FrI	(136,9)	4610

დარიშხანის (III) ჰალოგენიდების შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [59-65].

დარიშხანის (III) ჰალოგენიდების AsX_3 შესაბამისი რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე :

$$\begin{vmatrix} 33 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & Z_x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & Z_x & 0 \\ 1 & 0 & 0 & Z_x \end{vmatrix} \quad 80$$

სადაც 33 - დარიშხანის რიგობრივი ნომერია, Z_x - ჰალოგენების (F, Cl, Br, I) რიგობრივი ნომერი. ცხრილში 13-ში მოყვანილია AsX_3 -ის დუდილის ტემპერატურა, წარმოქმნის სითბო და $\lg(\Delta_{რ68})$ -ს მნიშვნელობები.

კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{დულ}} = 163,51 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) - 601,89 \quad 81$$

$$H_{298}^0 = 49,01 \lg(\Delta_{\text{რნზ}}) - 335,49 \quad 82$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,978 და 0,982. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 13. დარიშხანის (III) ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დუღილის ტემპერატურების და წარმოქმნის სითბოს მნიშვნელობები

ნაერთი	AsF ₃	AsCl ₃	AsBr ₃	AsI ₃
T _{დულ} , °C	57,8	130	291	371
ΔH ₂₉₈ ⁰	-226,8	-80,2	-46,61	-13,7
lg(Δ _{რნზ})	4,38	5,21	6,15	6,95

ჩატარებულია დარიშხანის ქვეჯგუფის (Aa, Sb, Bi) ჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [66-70]. ამ მოლეკულათა ზოგადი ფორმულაა:



სადაც, X=As, Sb, Bi. შესაბამისად რნზ - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\left\| \begin{array}{cccc} Z_x & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right\| \quad 84$$

ამ მატრიცის დეტერმინანტი ტოლია Δ_{რნზ} = Z_x - 3

ცხრილში 14 მოტანილია lg(Δ_{რნზ}) და ΔH_{f,298}⁰ დარიშხანის ჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდებისათვის.

ცხრილი 14. დარიშხანის ჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების და წარმოქმნის სითბოს მნიშვნელობები

H ₃ X	H ₃ As	H ₃ Sb	H ₃ Bi
lg(Δ _{რნზ})	1.48	1.68	1.90
ΔH _{f,298} ⁰	66.4	145	(234)

აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_{f,298}^0 = 393,0 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 512,2 \quad 85$$

$\Delta H_{f,298}^0$ H₃Bi-სთვის გამოთვლილია თეორიულად კორელაციური განტოლების გამოყენებით.

IV ჯგუფის B ქვეჯგუფის ელემენტების დიოქსიდების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა [71,72]

IV ჯგუფის B ქვეჯგუფის ელემენტების დიოქსიდების ზოგადი ფორმულაა:

$$O = X = O \quad 86$$

სადაც: X ≡ Ti, Zr, Hf, Rf (რეზერფორდიუმი)

(86) შესაბამისი რნბ-მატრიცაა:

$$\begin{vmatrix} 8 & 2 & 0 \\ 2 & Z_x & 0 \\ 0 & 2 & 8 \end{vmatrix} \quad 87$$

(87)-ის დეტერმინანტის მნიშვნელობა გამოითვლება ფორმულით:

$$\Delta = 64(Z_x - 1) \quad 88$$

ცხრილი 15-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$, T_{ლლ.}, ΔH_{298}^0 და ΔG_{298}^0 ამ ნაერთებისათვის.

ცხრილი 15. დიოქსიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, ლღობის ტემპერატურების, წარმოქმნის სითბოს და ჯიბსის პოტენციალის მნიშვნელობები

დიოქსიდი	Lg (Δ _{რნბ}),	T _{ლლ.} , °C	ΔH ₂₉₈ ⁰ კჯ/მოლი	ΔG ₂₉₈ ⁰ კჯ-მოლი
TiO ₂	3,13	1870	-840	-889
ZrO ₂	3,40	2850	-1100	-1043
HfO ₂	3,66	2900	-1118	-1061
RfO ₂	3,82	(3250)	(-1228)	(-1114)

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია სამი კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{ლლ.}} = 2000 \text{ Lg} (\Delta_{\text{ანბ}}) - 4390 \quad 89$$

$$\Delta H_{298}^0 = -519 \text{ Lg} (\Delta_{\text{ანბ}}) + 785 \quad 90$$

$$\Delta G_{298}^0 = -325 \text{ Lg} (\Delta_{\text{ანბ}}) + 128 \quad 91$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია 0,980; 0,982; 0,982. ამრიგად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

RfO₂-სათვის T_{ლ.}, ΔH⁰₂₉₈ და ΔG⁰₂₉₈ მნიშვნელობები გამოთვლილია თეორიულად, (89) - (91) ფორმულის გამოყენებით. ისინი ცხრილში 15-ში ფრჩხილებშია მოყვანილი.

ჩატარებულია ჰალოგენწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა რნბ მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [73]. ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც: X ≡ F, Cl, Br, I.

შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad 93$$

და შესაბამისი დეტერმინანტი გამოითვლება ფორმულით:

$$\Delta = Z_X - 1 \quad 94$$

ცხრილი 16-ში მოყვანილია lg(Δ_{რნბ}), ΔH_f⁰, ΔG_f⁰, E_{H-X} და μ ამ ნაერთებისთვის.

ცხრილი 16. ჰალოგენწყალბადებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, წარმოქმნის სითბოს, ჯიბსის პოტენციალის, ბმის ენერჯისა და დიპოლური მომენტის მნიშვნელობები

H - X	lg(Δ _{რნბ})	ΔH _f ⁰ კჯ/მოლი	ΔG _f ⁰ კჯ/მოლი	E _{H-X} კჯ/მოლი	μ · 10 ²⁹ , კ.მ
HF	0,90	-270,9	-272,8	525	0,640
HCl	1,20	-92,8	-94,8	431	0,347
HBr	1,53	-34,1	-53,2	364	0,263
HI	1,72	+26,6	+1,78	297	0,127

კომპიუტერზე, უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, აგებულია ოთხი კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_f^0 = 177,91 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 306,3 \quad 95$$

$$\Delta G_f^0 = 126,0 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 245,1 \quad 96$$

$$E_{H-X} = -203,01 (\Delta_{\text{რნბ}}) + 674,6 \quad 97$$

$$\mu = 0,255 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 0,653 \quad 98$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია: 0,981; 0,981; 0,985; 0,986. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

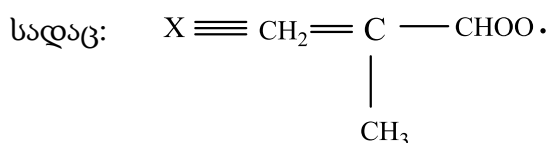
ზოგიერთი მეტაკრილის მჟავას რთული ეთერის თეორიული შესწავლა ქვაზი-რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [74].

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც: R = C₂H₅, C₃H₇, C₄H₉,

მათთვის შემუშავებული იყო გამარტივებული მოდელი:



მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\left\| \begin{array}{cc} Z_x & I \\ I & Z_R \end{array} \right\| \quad 101$$

მეტაკრილის მჟავას ზოგიერთი ესტერის შესაბამისი $\lg(\Delta_{\overline{\text{რნზ}}})$, d_4^{20} და n_D^{20} მოცემულია ცხრილი 17-ში.

ცხრილი 17. მეტაკრილის მჟავას ზოგიერთი ესტერის შესაბამისი ტოპოლოგიური ინდექსების, სიმკვრივის და გარდატეხის მაჩვენებლების მნიშვნელობები

	R	$\lg(\Delta_{\overline{\text{რნზ}}})$	d_4^{20}	n_D^{20}
1	C ₂ H ₅	2,84	0,9135	1,4147
2	C ₃ H ₇	3,01	0,9024	1,4188
3	C ₄ H ₉	3,13	0,8951	1,4240
4	C ₅ H ₁₁	3,23	0,8894	1,4281
5	C ₆ H ₁₃	3,32	0,8855	1,4320
6	C ₇ H ₁₅	3,37	(0,8814)	(1,4339)

კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$d_4^{20} = -0,057 \lg(\Delta_{\overline{\text{რნზ}}}) + 1,0735 \quad 102$$

$$n_D^{20} = -0,0411 \lg(\Delta_{\text{რწბ}}) + 1,2957 \quad 103$$

გამოთვლებმა აჩვენეს, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,988 და 0,985, ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია .

CH₂=C(CH₃)-COOC₇H₁₅-თვის d₄²⁰ და n_D²⁰ მნიშვნელობები გამოთვლილია თეორიულად (ეესტრაპოლაციით) (102) და (103) ფორმულის საფუძველზე (მოცემულია ფრჩხილებში).

რწბ-მატრიცის მეთოდის ფარგლებში შესწავლილი ერთფუძიანი, ნაჯერი, განუშტოებელი კარბონმჟავები [75-82]. მათთვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$X - Y \quad 104$$

სადაც: = CH₃, C₂H₅, C₃H₇, C₄H₉ ..., Y = COOH.

შესაბამისად რწბ-მატრიცაა:

$$\begin{vmatrix} Z_X & 1 \\ 1 & Z_Y \end{vmatrix} \quad 105$$

ცხრილი 18. კარბონმჟავებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დუდილის ტემპერატურის და სიმკვრივის მნიშვნელობები

კარბონმჟავა	lg(Δ _{რწბ}),	T _{დუღ.} , °C	d ₄ ²⁰
HCOOH	1,08	100,5	122
CH ₃ COOH	2,31	126,2	1,049
CH ₃ CH ₂ COOH	2,52	141,1	0,998
CH ₃ (CH ₂) ₂ COOH	2,76	163,5	0,964
CH ₃ (CH ₂) ₃ COOH	2,88	186,3	0,939
CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	2,97	205,8	0,927
CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	3,03	223	0,918
CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	3,10	239,7	0,916
CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	3,17	255,6	0,906
CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	3,22	274	0,853

რწბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი -

$\lg(\Delta_{\text{წბ}})$, წარმოადგენს ეფექტურ მოლეკულურ დისკრიპტორს (ტოპოლოგიურ ინდექსს).

ცხრილი 18-ში მოტანილია $\lg(\Delta_{\text{წბ}})$, $T_{\text{დულ.}}$ და d_4^{20} ამ კარბონმჟავებისათვის .

კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{დულ.}} = 250,0 \lg(\Delta_{\text{წბ}}) - 536,7 \quad 106$$

$$T_{\text{დულ.}} = 0,080 \lg(\Delta_{\text{წბ}}) + 1,160 \quad 107$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად, ტოლია: 0,963; 0,981. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით , კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

სილანების შესწავლა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [83,84].

სილანების ჰომოლოგიური რიგის ზოგადი ფორმულაა $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$. მათთვის შემუშავებულია მარტივი მოდელი

$$\text{X-Y} \quad 108$$

სადაც: $\text{X} \equiv \text{SiH}_3$; $\text{Y} \equiv \text{H}, \text{SiH}_3, \text{Si}_2\text{H}_5, \text{Si}_3\text{H}_7 \dots$

ცხრილი 19-ში მოტანილია $\lg(\Delta_{\text{წბ}}^{\sim})$, $T_{\text{ლლ.}}$ და $T_{\text{დულ.}}$ ზოგიერთი სილანისთვის.

ცხრილი 19. ზოგიერთი სილანისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, ლღობის და დუღილის ტემპერატურები

სილანი	SiH_4	Si_2H_6	Si_3H_8	Si_4H_{10}	Si_5H_{12}
$\lg(\Delta_{\text{წბ}}^{\sim})$	1,20	2,16	2,75	2,92	3,04
$T_{\text{ლლ.}} \text{ } ^\circ\text{C}$	-185	-132	-117	-94	(-84)
$T_{\text{დულ.}} \text{ } ^\circ\text{C}$	-112	-15	+53	+86	(+112)

$T_{\text{ლლ.}}$ და $T_{\text{დულ.}}$ Si_5H_{12} -სათვის გამოთვლილია თეორიულად, ექსტრაპოლაციით, (109) და (110) ფორმულების საფუძველზე.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

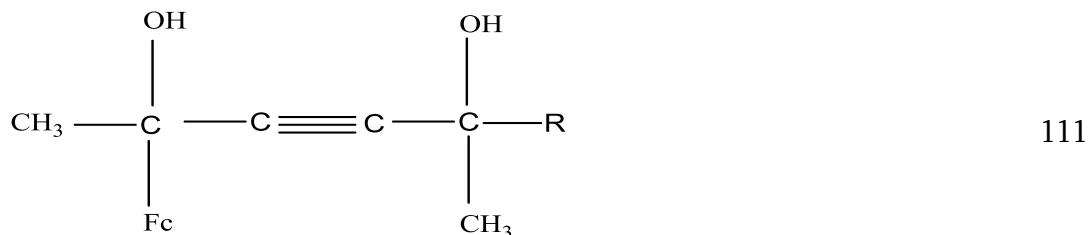
$$T_{\text{ლლ.}} = 82,6 \lg(\Delta_{\text{წბ}}^{\sim}) - 335,2 \quad 109$$

$$T_{\text{დულ.}} = 219,57 \lg(\Delta_{\text{წბ}}^{\sim}) - 555,0 \quad 110$$

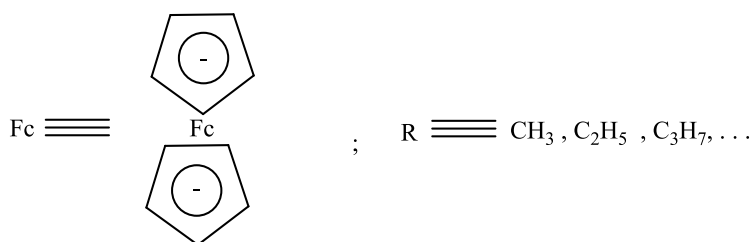
კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,989 და 0,988-ს. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ფეროცენის რიგის α -გლიკოლების შესწავლა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [85].

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც:



ამ ნაერთებისათვის შემუშავებული იყო უმარტივესი მოდელი

$$\text{X-R} \quad 112$$

ცხრილი 20. ფეროცენის რიგის α -ზოგიერთი გლიკოლისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების და ლლობის ტემპერატურა

R	lg(Δ რნბ)	T _ლ , °C
CH ₃	3,22	119
C ₂ H ₅	3,50	93
C ₃ H ₇	3,66	86

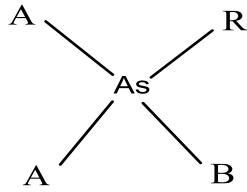
კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{ლ.}} = -75,0 \lg(\Delta\text{რნბ}) + 360,5 \quad 113$$

r კორელაციის კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,989. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, ადგილი აქვს დამაკმაყოფილებად კორელაციას.

მეთილდი-პ-ტოლილალკილარსონიუმის იოდიდების თეორიული შესწავლა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [86-89].

თეორიულად შესწავლილის მეთილდი-პ-ტოლილალკილარსონიუმის იოდიდები [(პ-CH₃C₆H₄)₂AsR)CH₃)]I ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში ; მათთვის შემუშავებული იყო გამარტივებული მოდელი:



114

სადაც: A - შეესაბამება β - $CH_3C_6H_4$ -ს; B - CH_3 -ს; R - შეიძლება იყოს: CH_3 , C_2H_5 , C_3H_7 , C_4H_9 , C_5H_{11} . შესატყვის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix}
 Z_B & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 33 & 1 & 1 & 1 \\
 0 & 1 & Z_A & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & Z_A & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & Z_R
 \end{vmatrix}$$

115

ამ ნაერთების შესაბამისი $T_{ლ.}$ და $\lg(\Delta_{რნბ})$ მოცემულია 21 ცხრილში.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$T_{ლ.} = -150,29 \lg(\Delta_{რნბ}) + 1205,31 \quad 116$$

გამოთვლებმა აჩვენეს, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი 0,961-ის ტოლია; ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაცია დამაკმაყოფილებელია .

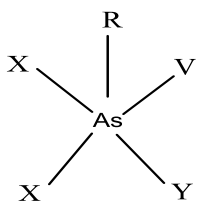
ცხრილი 21. [(β - $CH_3C_6H_4$) $_2$ AsR(CH_3)]I ნაერთებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და ლღობის ტემპერატურა

#	R	$T_{ლ.}$ °C	$\lg(\Delta_{რნბ})$
1	CH_3	185	6,77
2	C_2H_5	194	7,04
3	C_3H_7	147	7,20
4	C_4H_9	142	7,30
5	C_5H_{11}	95	7,43

დიფენილმეთილალკილარსონიუმის პერქლორატების თეორიული გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [90,91].

თეორიულად შესწავლილია დიფენილმეთილალკილარსონიუმის პერქლორატებში $[(C_6H_5)_2As(CH_3)R]ClO_4$ ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში .

მათთვის შემუშავებული იყო გამარტივებული მოდელი:



117

სადაც: X - შესაბამება C₆H₅-ს; Y - CH₃-ს; V - ClO₄-ს; R - შეიძლება იყოს: CH₃; C₂H₅, C₃H₇, C₄H₉, C₅H₁₁. შესატყვის რ^{ნბ} - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix}
 Z_R & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 33 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 0 & 1 & 41 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 41 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 9 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 49
 \end{vmatrix}$$

118

ამ ნაერთების შესაბამისი T_{ლ.} და lg(Δ^{ნბ}) მოცემულია 22 ცხილში.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{ლ.}} = -90,921 \lg(\Delta_{\text{ნბ}}) + 893,35 \quad 119$$

გამოთვლებმა აჩვენეს, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი 0,963-ის ტოლია.

ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 22. [(C₆H₅)₂As(CH₃)R]ClO₄ ნაერთებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და ლღობის ტემპერატურა

#	R	T _{ლ.} °C	lg(Δ ^{ნბ})
1	CH ₃	136	8,34
2	C ₂ H ₅	95	8,62
3	C ₃ H ₇	115	8,78
4	C ₄ H ₉	93	8,90
5	C ₅ H ₁₁	60	9,00

ნიტროალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რ^{ნბ}-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [92].

ნიტროალკანების ზოგადი ფორმულა:

$$R - \text{NO}_2 \quad 120$$

სადაც, R - ალკილის რადიკალია.

ამ ნაერთებისათვის შევიმუშავეთ მარტივი მოდელი:

$$R - X \quad 121$$

სადაც, X = NO₂

შესაბამის კვაზი-რნზ-მატრიცას გააჩნია ზოგადი სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_R & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad 122$$

ასე მაგალითად, ნიტრომეთანებისათვის, კვაზი-რნზ-მატრიცას გააჩნია კონკრეტული სახე: $Z_{CH_3} = 9$; $Z_{NO_2} = 23$

$$\begin{vmatrix} 9 & 1 \\ 1 & 23 \end{vmatrix} \quad 123$$

ცხრილი 23. ზოგიერთი ნიტრონაერთების ტოპოლოგიური ინდექსების, ლღობის ტემპერატურა და სიმკვრივე

ნიტროალკანი	$\lg(\Delta_{\overline{RNB}})$	T _{ღულ.}	d ₄ ²⁰
CH ₃ NO ₂	2.31	101.4	1.138
C ₂ H ₅ NO ₂	2.53	114.0	1.050
C ₂ H ₇ NO ₂	2.76	131.6	1.001

ცხრილი 23-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\overline{RNB}})$, T_{ღულ.} და d₄²⁰ ზოგიერთი ნიტროალკანისათვის.

აგებულია ორი კორელაციურ განტოლება:

$$d_4^{20} = -0,304 \lg(\Delta_{\overline{RNB}}) + 1,840 \quad 124$$

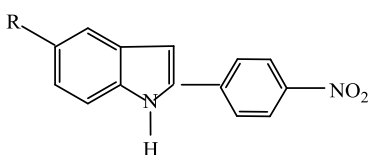
$$T_{\text{ღულ.}} = 66,67 \lg(\Delta_{\overline{RNB}}) - 52,50 \quad 125$$

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

2-პ-ნიტროფენილინდოლის ზოგიერთი ნაწარმის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა [93-95] .

ჩატარებულია სინთეზირებული 2-პ-ნიტროფენილინდოლის სამი ნაწარმის (126) ანალიზი კვაზი-რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



126

სადაც R=CH₃, Cl, Br.

(126) ნაერთებისათვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$R-X \quad 127$$

სადაც X (126) მოლეკულის ძირითადი სტრუქტურული ფრაგმენტია (მთელი მოლეკულური R-ის გარეშე). შესაბამისი რნბ-მატრიცაა:

$$\begin{vmatrix} Z_R & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad 128$$

ცხრილი 24-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$, $T_{\text{ლ.}}$ და R_f (2) ნაერთებისთვის.

ცხრილი 24. ზოგიერთი 2-პ-ნიტროფენილინდოლის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლობის ტემპერატურები და მოლეკულური რეფრაქციები

R	$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$,	$T_{\text{ლ.}}$	R_f
CH ₃	3.04	208	0.64
Cl	3.32	237	0.53
Br	3.63	246	0.47

კომპიუტერზე - უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით - აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{ლ.}} = 103,07 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 106,85 \quad 129$$

$$R_f = 1,831 - 0,392 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) \quad 130$$

აღმოჩნდა, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია: 0,980 და 0,979. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

განუშტოებელი ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [96].

ქვაზი-რნბ მატრიცების მეთოდის ფარგლებში ჩატარებულია განუშტოებელი (სწორ-ჯაჭვიანი ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა (ეთანიდან დეკანის ჩათვლით). ამ ნაერთებისათვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$A - B \quad 131$$

სადაც: $A \equiv \text{CH}_3$; $B \equiv \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7 \dots$

შესაბამისი რნბ-მატრიცა მეორე რანგისაა და გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_A & 1 \\ 1 & Z_B \end{vmatrix} \quad 132$$

ცხრილში 25 მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{სწ}})$ და S_{298}^0 მნიშვნელობები C_2H_6 -დან $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ -ის ჩათვლით .

ცხრილი 25. ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების და სტანდარტული ენტროპიების მნიშვნელობები

ალკანი	$\lg(\Delta_{\text{სწ}})$	$S_{298, 30}^0$
C_2H_6	1.90	54.85
C_3H_8	2.18	64.51
C_4H_{10}	2.35	74.12
C_5H_{12}	2.47	83.40
C_6H_{14}	2.57	92.83
C_7H_{16}	2.64	102.27
C_8H_{18}	2.71	111.15
C_9H_{20}	2.77	120.86
$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	2.82	130.17

კომპიუტერზე, უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$S_{298}^0 = 125,01 \cdot \lg(\Delta_{\text{სწ}}) - 225,35 \quad 133$$

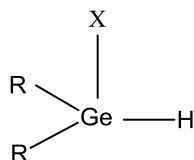
კორელაციის r კოეფიციენტი (133) კორელაციური განტოლების შემთხვევაში უდრის 0,995. ამგვარად, ადგილი აქვს დამაკმაყოფილებელ კორელაციას.

ამგვარად, $\lg(\Delta_{\text{სწ}})$ წარმოადგენს ეფექტურ ტოპოლოგიურ ინდექსს ამ ტიპის ნაერთებისათვის.

გერმანიუმის ნაერთების მათემატიკური გამოკვლევა [97-105] .

ზოგიერთი ორგანოჰალოგენგერმანიუმიჰიდრიდის შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში .

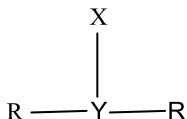
ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



134

სადაც: R - ალკილის რადიკალია; X ≡ F, Cl, Br, I .

ამ ნაერთებისთვის შემუშავებულია პროფ. მ. გვერდწითელის და გ. ჩაჩავას მიერ მოდელი:



135

ცხრილი 26 . ზოგიერთი ორგანოჰალოგენგერმანიუმჰიდრიდისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, გარდატეხის მაჩვენებლის და სიმკვრივის მნიშვნელობები

ნაერთი	$\lg(\Delta_{\overline{666}})$	$\eta_{D^{20}}$	d_4^{20}
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Ge}(\text{H})\text{F}$	4,93	1,4132	1,2158
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Ge}(\text{H})\text{Cl}$	5,21	1,4572	1,2409
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Ge}(\text{H})\text{Br}$	5,52	1,4888	1,5340
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Ge}(\text{H})\text{I}$	5,76	1,5381	1,7712

ცხრილი 26-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\overline{666}})$, η_D^{20} და d_4^{20} ამ ნაერთებისათვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\eta_{D^{20}} = 0,1623 \lg(\Delta_{\overline{666}}) + 0,6132 \quad 136$$

$$d_4^{20} = 0,7323 \lg(\Delta_{\overline{666}}) - 2,3944 \quad 137$$

r კორელაციის კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,989 და 0,987. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

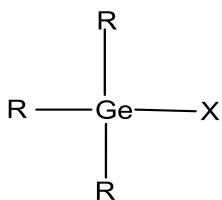
ზოგიერთი ორგანოგერმანიუმჰოცინანატის შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში .

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც: R ალკილის რადიკალებია.

ამ ნაერთებისათვის შემუშავებულია მოდელი:



139

სადაც: $X \equiv \text{NCO}$

ცხრილი 27-ში მოყვანილია $\lg(\overline{\Delta_{\text{რნბ}}})$, $T_{\text{დულ.}}$ და d_4^{20} ამ ნაერთებისათვის კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$T_{\text{დულ.}} = 94,001\lg(\overline{\Delta_{\text{რნბ}}}) - 412,88 \quad 140$$

$$d_4^{20} = -0,192 \lg(\overline{\Delta_{\text{რნბ}}}) + 2,402 \quad 141$$

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

$(\text{CH}_3)_3\text{Ge}(\text{H})\text{NCO}$ -თვის d_4^{20} მნიშვნელობა გამოთვლილია თეორიულად, (141) ფორმულის საფუძველზე.

ცხრილი 27 . ზოგიერთი ორგანოგერმანიუმბოციანატისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დუდილის ტემპერატურების და სიმკვრივის მნიშვნელობები

ნაერთი	$\lg(\overline{\Delta_{\text{რნბ}}})$	$T_{\text{დულ.}} \text{ } ^\circ\text{C}$	d_4^{20}
$(\text{CH}_3)_3\text{Ge}(\text{H})\text{NCO}$	5,69	122	(1,311)
$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{Ge}(\text{H})\text{NCO}$	6,52	200,4	1,151
$(\text{C}_3\text{H}_7)_3\text{Ge}(\text{H})\text{NCO}$	7,62	247	1,055
$(\text{C}_4\text{H}_9)_3\text{Ge}(\text{H})\text{NCO}$	8,38	283	1,044

ჰალოგენმეთანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [106-109].

რნბ-მატრიცის მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია მონოჰალოგენმეთანები. მათთვის გამოყენებულია მარტივი მოდელი: $R - X$

სადაც:

$$R \equiv \text{CH}_3, X \equiv \text{F, Cl, Br, I} \quad 142$$

შესაბამის რნბ - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_r & 1 \\ 1 & Z_r \end{vmatrix} \quad 143$$

ცხრილში 28 მოყვანილია $\lg(\overline{\Delta_{\text{რნბ}}})$, პოლარიზება $\alpha(10^{-3} \text{ ნმ/მოლი})$ და იონიზაციის პირველი პოტენციალი მონოჰალოგენებისათვის.

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$\alpha = 7.2 \lg(\Delta_{\overline{568}}) - 12.5 \quad 144$$

$$I_1 = -3,80 \lg(\Delta_{\overline{568}}) + 19,56 \quad 145$$

კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია: 0,988 და 0,984. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 28. მონოჰალოგენმეთანების ტოპოლოგიური ინდექსები, პოლარიზებადობა და იონიზაციის პირველი პოტენციალი

ნაერთი	$\lg(\Delta, \overline{568})$,	$\alpha, 10^{-3}$ ნმ/მოლი	I_1, ev
CH ₃ F	1.90	1.2	(12, 34)
CH ₃ Cl	2.18	3.2	11.28
CH ₃ Br	2.50	4.6	10.53
CH ₃ I	2.68	6.8	9.38

I_1 -ის მნიშვნელობა CH₃F-თვის გამოთვლილია თეორიულად (145) ფორმულის საფუძველზე (ცხრილში მოყვანილია ფრჩხილებში).

Hg(I) ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში[110].

ჩატარებულია Hg(I) ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. ამ ნაერთებისათვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:



სადაც: X=F, Cl, Br, I; Y=(Hg-Hg).

შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} 160 & 1 & 1 \\ 1 & Z_x & 0 \\ 1 & 0 & Z_x \end{vmatrix} \quad 147$$

ცხრილი 29-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\overline{668}})$, ΔH^0_{298} , ΔS^0_{298} , ΔG^0_{298} Hg₂X₂ ნაერთებისთვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\Delta H^0_{298} = 34,45 \lg(\Delta_{\overline{668}}) - 226,23 \quad 148$$

$$\Delta S^0_{298} = 23,80 \lg(\Delta_{\overline{668}}) - 161,53 \quad 149$$

$$\Delta G^0_{298} = 9,43 \lg(\Delta_{\overline{668}}) + 2,76 \quad 150$$

r კორელაციის კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,984; 0,986 და 0,989.

ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

Hg₂F₂-თვის ΔH⁰₂₉₈, ΔS⁰₂₉₈, ΔG⁰₂₉₈ გამოთვლილია თეორიულად (ექსტრაპოლაციით) (148)-(150) ფორმულების საფუძველზე (მოცემულია ფრჩხილებში).

ცხრილი 29. ვერცხლისწყლის (I) ჰალოგენიდების ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო, სტანდარტული ენტროპია და ჯიბსის პოტენციალი

Hg ₂ X ₂	lg(Δ _{გვ})	ΔH ⁰ ₂₉₈ , კკალ/მოლი	ΔS ⁰ ₂₉₈ , ე.ე.	ΔG ⁰ ₂₉₈ , კკალ/მოლი
Hg ₂ F ₂	4,11	(-84,64)	(-63,61)	(41,52)
Hg ₂ Cl ₂	4,67	-63,35	-50,37	46,80
Hg ₂ Br ₂	5,30	-49,49	-43,34	52,03
Hg ₂ I ₂	5,67	-28,90	-26,58	56,23

ნორმალური ალკანების შესწავლა ეკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

[111].

ცხრილი 30. ნორმალური ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და სტანდარტული ენტროპია

ალკანი	lg(Δ _{გვ})	ΔS ⁰ ₂₉₈
ჰექსანი	6,71	92,83
ჰეპტანი	7,73	102,24
ოქტანი	8,75	111,55
ნონანი	9,76	120,86
დეკანი	10,78	130,17
უნდეკანი	11,60	139,48
დოდეკანი	12,81	148,78
ტრიდეკანი	13,83	158,09
ტეტრადეკანი	14,85	167,40
პენტადეკანი	15,87	176,71
ჰექსადეკანი	16,88	186,02
ჰეპტადეკანი	17,90	195,33
ოქტადეკანი	18,92	204,64
ნონადეკანი	19,93	213,95
ეიკოზანი	20,95	223,26

ნორმალური (განუშტოებელი) ალკანების ჰომოლოგიური რიგი შესწავლილი იყო ეკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. ცხრილ 30-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{გ3}})$ და ΔS^0_{298} პირველი ოცი ჰომოლოგისათვის.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\Delta S^0_{298} = 9,16 \lg(\Delta_{\text{გ3}}) + 30,96 \quad 151$$

r კორელაციის კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,995. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, ადგილი აქვს ბრწყინვალე კორელაციას.

აქვე ავლნიშნავთ, რომ ნორმალური ალკანებისათვის $\Delta_{\text{გ3}}$ გამოითვლება ფორმულით:

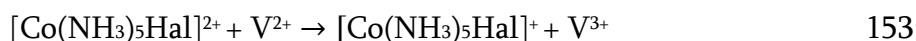
$$\Delta_{\text{გ3}} = 441 \cdot (10,4)^{n-2} \quad 152$$

სადაც n-ნორმალურ ალკანში შემავალი ნახშირბადატომების რიცხვია.

[Co(NH₃)₅Hal]²⁺ + V² რედოქს რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [112-115] .

აღსანიშნავია, რომ ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდი სპეციფიკურ სირთულეს აწყდება კოორდინაციული ნაერთებისა და მათი გარდაქმნების შესწავლისას. სწორედ ამ პრობლემის გადაჭრის ერთ-ერთი მიდგომაა წარმოჩენილი წარმოდგენილ კვლევაში.

კოორდინაციული ნაერთების ისეთი ჯგუფის დახასიათებისათვის, სადაც სტრუქტურებში იცვლება მხოლოდ ერთი მონოდენტატური ლიგანდი (კერძო შემთხვევაში-ერთატომიანი) შემუშავდა ე.წ. ბლოკ-მატრიცა. კოორდინაციული ნაერთის მოლეკულა იყოფა ორ სტრუქტურულ ფრაგმენტად: მონოდენტურ ლიგანდად და მოლეკულის დანარჩენ ნაწილად. ასეთი მიდგომის ფარგლებში შესწავლილია რედოქს რეაქცია:



სადაც: Hal = F, Cl, Br, I

ამ რეაქციისთვის არსებობს ექსპერიმენტულად განსაზღვრული სიჩქარის მუდმივების ($\lg k$) მონაცემები. გამოკვლეულია კორელაცია [Co(NH₃)₅Hal] სტრუქტურასა და შესაბამის $\lg k$ -ს მნიშვნელობებს შორის.

კომპლექსური კატიონისთვის შემუშავებულია მოდელი:

$$\text{B} - \text{X} \quad 154$$

სადაც: X - ჰალოგენიდია, B - მოლეკულის დანარჩენი ფრაგმენტი (ბლოკი).
შესაბამისი ბლოკ-მატრიცა (B-მატრიცა) შემდეგია:

$$\begin{vmatrix} Z_B & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad 155$$

სადაც: Z_B -ბლოკში შემავალი ყველა ატომის ატომური ნომრების ჯამია, Z_X - შესაბამისი ჰალოგენის ატომური ნომერი.

ცხრილში 31 მოცემულია $\lg(\Delta b)$ და $\lg k$ მნიშვნელობები განხილული სისტემებისთვის.

ცხრილი 31. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Hal}]$ სტრუქტურისთვის ტოპოლოგიური ინდექსების და რეაქციის სიჩქარის მუდმივების მნიშვნელობები

კომპლექსური კატიონი	$\lg(\Delta b)$	$\lg k$
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Fl}]^{2+}$	2.84	0.415
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$	3.12	0.568
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Br}]^{2+}$	3.42	1.406
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{I}]^{2+}$	3.61	2.080

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\lg k = 1,700 \lg(\Delta B) - 4.414 \quad 156$$

კორელაციის კოეფიციენტი $r=0.991$, ასე რომ, ჯაფეს კრიტერიუმით ადგილი აქვს ბრწყინვალე კორელაციას.

AB_4 ტიპის მოლეკულები შესწავლილია ჯანბ-მატრიცის ფარგლებში [116].

კერძოდ, AB_4 ტიპის მოლეკულის შესაბამისი ჯანბ-მატრიცაა:

$$\begin{vmatrix} Z_A & 4 \\ 4 & 4Z_B \end{vmatrix} \quad 157$$

ცხრილში 32 წარმოდგენილია $\lg(\Delta r_{\text{ნბ}})$, $\lg(\Delta \chi_{\text{ანბ}})$, $T_{\text{დულ.}}^{\circ\text{C}}$ და $\Delta H^{\circ\text{f}} \text{XH}_4$ მოლეკულებისათვის (X - მეოთხე ჯგუფის A - ქვეჯგუფის ელემენტებია: C, Si, Ge, Sn, Pb).

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია სამი კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{დულ.}} = 90 \lg(\Delta \chi_{\text{ანბ}}) - 256 \quad 158$$

$$\Delta H^{\circ f} = 144 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 275$$

159

აღმოჩნდა, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია: 0,983; 0,982. ამრიგად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 32. XH_4 მოლეკულებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო, დუდილის ტემპერატურა და წარმოქმნის სითბო

XH_4	$\text{Lg}\Delta_{\text{ა5ბ}}$	$\text{Lg}(\Delta_{\text{5ბ}})$	$T_{\text{დუდ.}}^{\circ\text{C}}$	$\Delta H^{\circ f}$
CH_4	0,0	0,90	-164	-75
SiH_4	1,00	1,60	-112	35
GeH_4	1,45	2,05	-86	91
SnH_4	1,66	2,25	-52	163
PbH_4	1,90	2,49	(-12)	256

ცხრილში 32 (ფრჩხილებში) მოყვანილი ღღობის ტემპერატურა PbH_4 -თვის გამოთვლილია თეორიულად, (158) კორელაციური განტოლების საფუძველზე.

ამავე ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში ჩატარებლია ტიტანის ტეტრაჰალოგენიდების - TiX_4 ($\text{X} \equiv \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა [117].

ცხრილში 33 მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$, ΔH_f° და ΔG_f° ტიტანის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის .

ცხრილი 33. ტიტანის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი

ნაერთი	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f° , კკალ/მოლი	ΔG_f° , კკალ/მოლი
TiF_4	3,46	-371	-362
TiCl_4	3,74	-182	-173
TiBr_4	4,05	-132	-136
TiI_4	4,24	-69	-81

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, კომპიუტერზე აგებულია

ორი კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_f^0 = 226 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 1026 \quad 160$$

$$\Delta G_f^0 = 184 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 860 \quad 161$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად, ტოლია 0,978 და 0,977. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

სილიციუმის ტეტრაჰალოგენწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ჩატარებულია ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [118].

ცხრილში 34 მოტანილია $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$, ΔH_f^0 და ΔG_f^0 სილიციუმის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის.

ცხრილი 34. სილიციუმის ტეტრაჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბსის პოტენციალი

SiX ₄	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f^0 , კჯ/მოლი	ΔG_f^0 , კჯ/მოლი
SiF ₄	2,74	-1614	-1572
SiCl ₄	2,97	-688	-598
SiBr ₄	3,11	-430	-214
SiI ₄	3,47	-161	-136

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_f^0 = 1054 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 3808 \quad 162$$

$$\Delta G_f^0 = 924 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 3342 \quad 163$$

კორელაციის კოეფიციენტი r , შესაბამისად, ტოლია: 0,983; 0,985. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით [6], კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

მათემატიკურ-ქიმიური მიდგომის ფარგლებში შესწავლილია ურანის ოთხი ქლორიდი [119]. ცხრილი 35-ში მოყვანილია ამ ნივთიერებების ფორმულები, $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$, ΔH_f^0 და ΔG_f^0 . ამ შემთხვევაში "მოლეკულა" სამატომიანი, ხუთატომიანი, ექვსატომიანი და შვიდატომიანია.

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_f^0 = -125 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + 224 \quad 164$$

$$\Delta G_f^0 = -98 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + 143$$

165

ცხრილი 35. ურანის ქლორიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და და ჯიბსის პოტენციალი

ნაერთი	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f^0 , კკალ/მოლი	ΔG_f^0 , კკალ/მოლი
UCl ₂	3,49	-212	-197
UCl ₄	3,80	-251	-230
UCl ₅	3,89	-262	-236
UCl ₆	3,92	-273	-241

აღმოჩნდა, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად, ტოლია: 0,978; 0,977. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ABn ტიპის მოლეკულების მათემატიკურ-ქიმიური მოდელი განხილულია ჯანბ-მატრიცის ფარგლებში [120].

ცხრილში 36 მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$, ΔH_f^0 და T_{ლ.} ამ ნივთიერებებისათვის .

ცხრილი 36. ბორის ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ლლობის ტემპერატურა

BX ₃	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f^0	T _{ლ.} °C
BF ₃	2,10	-1137	-127
BCl ₃	2,39	-427	-107
BBr ₃	2,71	-243	-46
BI ₃	13	2,90	-38

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება.

$$\Delta H_f^0 = 1465 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 4203 \quad 166$$

$$T_{\text{ლ.}} = 140 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 411 \quad 167$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ r კორელაციის კოეფიციენტი, შესაბამისად, ტოლია: 0,984, 0,982. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

AB₃ ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [121].

ამ მიდგომის ფარგლებში შესწავლილია ალუმინის ჰალოგენიდები - AlX₃ (X = F, Cl, Br, I), რომელთათვისაც მატრიცას ექნება სახე:

$$\begin{vmatrix} 13 & 3 \\ 3 & 3Z_B \end{vmatrix} \quad 168$$

ცხრილში 37 მოცემულია $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$, ΔH_f^0 და ΔG_f^0 [6] ალუმინის ჰალოგენიდებისათვის.

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, კომპიუტერზე აგებულია ორი კორელაციური განტოლება.

$$\Delta H_f^0 = 1661 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 5711 \quad 169$$

$$\Delta G_f^0 = 1651 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) - 5609 \quad 170$$

კორელაციის r კოეფიციენტი, შესაბამისად, ტოლია: 0,983; 0,982. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმების მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

ცხრილი 37. ალუმინის ჰალოგენიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები, წარმოქმნის სითბო და ჯიბის პოტენციალი

AlX ₃	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f^0 , ჯ/მოლი	ΔG_f^0 , კჯ/მოლი
AlF ₃	2,53	-1506	-1432
AlCl ₃	2,82	-705	-629
AlBr ₃	3,13	-513	-491
AlI ₃	3,31	-308	-304

ACn ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [122].

ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია ურანის სამი ოქსიდი: UO, UO₂ და UO₃. ცხრილში 38 მოყვანილია $\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$ და ΔH_f^0 ამ ნაერთებისათვის. (შევნიშნავთ, რომ UO-ს შემთხვევაში რნბ- და ჯანბ-მატრიცები ერთნაირია).

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_f^0 = -450 \lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + 1157 \quad 171$$

ცხრილი 38. ურანის ოქსიდებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები და წარმოქმნის სიბო

ნაერთები	$\lg(\Delta_{\text{ჯანბ}})$	ΔH_f^0 , კკალ/მოლი
UO	2,86	-133
UO ₂	3,16	-268
UO ₃	3,44	-288

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ კორელაციის კოეფიციენტი $r=0,987$. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

ალგებრული ქიმიის ფარგლებში, რნბ, ქვაზი-რნბ, ფსევდო-რნბ მატრიცების მეთოდის გამოყენებით, მარტივი და რთული ეთერები [123-126], ალდეჰიდები [127,128], ამინომჟავები [129], ამინები [130], ოქსონაერთები [131,132], თიოლები[133-135], ჰალოგენალკანები[136-139].

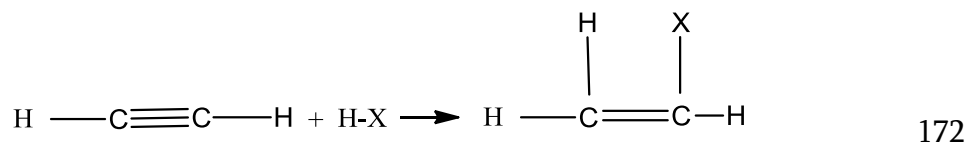
1.3. ქიმიური რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

პირველი ცდა ქიმიური რეაქციების ფორმალური მათემატიკური გამოკვლევისა ჩატარდა XX საუკუნის დასაწყისში ვ. ვასილევის მიერ, ქიმიური ინვარიანტების თეორიის გამოყენებით. ეს მიდგომა ინტენსიურად ვითარდება ბოლო სამ ათწლეულში. ქიმიური პროცესების აღწერის სხვადასხვა კონცეფციებიდან აღსანიშნავია: ბალაბანის, ლალას, ჰენდრიქსონის, უგის და დუგუჯის, ზეფიროვისა და ტრაჩის და სხვა კონცეფციები.

ქართველი მკვლევარების მიერ შემუშავებულია რეაქციების აღწერის მათემატიკურ-ქიმიური მეთოდი რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცების საშუალებით [140-145]. პარალელურად გამოიყენება შენონის ინფორმაციის ენტროპიის მოდერნიზებული მოდელი. განვიხილოთ რეაქციათა ზოგიერთი მნიშვნელოვანი კლასი.

მიერთების და ციკლომიერთების რეაქციების დახასიათება რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [146-148].

განვიხილოთ აცეტილენის ჰიდროჰალოგენირების რეაქცია:



მის ჩანაწერს რნბ-მატრიცის ფორმით გააჩნია სახე:

$$\left\| \begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & Z_x \end{array} \right\| \longrightarrow \left\| \begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & Z_x \end{array} \right\| \quad 173$$

განვიხილოთ გამოსახულება:

$$\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i \quad 174$$

სადაც: Δ_f - საბოლოო სისტემის შესაბამისი რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა, Δ_i - საწყისი რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობა, Δ_r - დეტერმინანტის მნიშვნელობის ცვლილება რეაქციის შედეგად.

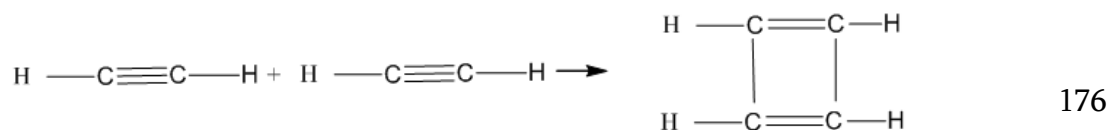
დადგენილია, რომ Δ_r ასახავს სისტემის სირთულის შეცვლას თუ $\Delta_r > 0$ სისტემის სირთულე იზრდება; თუ $\Delta_r < 0$ სისტემის სირთულე მცირდება.

(172) რეაქციისთვის

$$\Delta_r = 12 > 0 \quad 175$$

ამგვარად, რეაქციას ახლავს სისტემის სირთულის გაზრდა.

განვიხილოთ აცეტილენის ციკლომერიზაციის რეაქცია: (შესწავლილია პროფ. მ. გვერდწითელის და რ. დევდარიანის მიერ)



მისი მატრიცული ჩანაწერი იქნება :

$$\left| \begin{array}{cccccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 6 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 6 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right| \rightarrow \left| \begin{array}{cccccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 6 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right| \quad 177$$

აღმოჩნდა, რომ ამ პროცესისთვის:

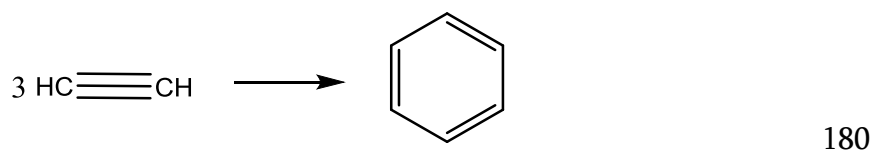
$$\Delta_r = 128 > 0 \quad 178$$

ამრიგად, Δ_r იზრდება, რაც ნიშნავს, რომ სისტემის სირთულეც იზრდება.

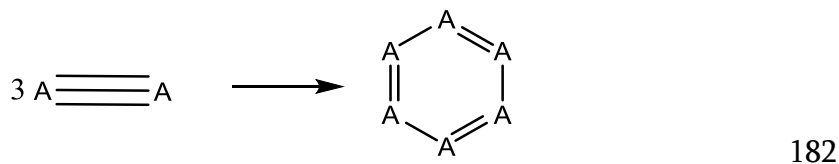
ანალოგიური შედეგი მიიღება მიერთებისა და ციკლომიერთების ზოგიერთი პროცესის ანალიზითაც. ამგვარად, შეიძლება დავასკვნათ, რომ მიერთება და ციკლომიერთება მიმდინარეობს სისტემის სირთულის გაზრდით.

აცეტილენის დიმერიზაციის და ციკლოდიმერიზაციის რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა [149,150].

რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია აცეტილენის ტრიმერიზაციის და ციკლოტრიმერიზაციის რეაქციები



ამ რეაქციების მოდელური ჩანაწერებია:



სადაც: $\text{A} \equiv \text{CH}$, $\text{B} \equiv \text{CH}_2$, C - ნახშირბადატომია.

რნბ - მატრიცების სახით (181) პროცესის ჩანაწერია:

$$\begin{vmatrix} 7 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 7 \end{vmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix} 8 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 6 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 7 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 8 \end{vmatrix} \quad 183$$

(4) პროცესის ჩანაწერია:

$$\begin{vmatrix} 7 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 7 \end{vmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix} 7 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 7 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 7 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 7 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 7 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 7 \end{vmatrix} \quad 184$$

განვიხილოთ გამოსახულება:

$$\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i \quad 185$$

სადაც: Δ_f - საბოლოო სისტემის შესაბამისი რწზ - მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა; Δ_i - საწყისი სისტემის შესაბამისი რწზ - მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობა; Δ_r - დეტერმინანტის მნიშვნელობის ცვლილება რეაქციის შედეგად.

ორივე განხილული რეაქციის $\Delta_r < 0$. თუ გავითვალისწინებთ, რომ Δ -ს სიდიდე მოლეკულური სირთულის პროპორციულია, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ აცეტილენის როგორც ტრიმერიზაცია, ისე ციკროტრიმერიზაცია მიმდინარეობს მოლეკულური სირთულის შემცირებით.

შენონის ინფორმაციის ენტროპია (183) და (184) რეაქციებისთვის გამოითვლება ფორმულით:

$$H = - \sum p_i \log_2 p_i \quad 186$$

სადაც: p_i - გარკვეული ცდომილების (მაგ.: A-სტრუქტურული ფრაგმენტის ალალბედზე "შეხვედრის") ალბათობაა.

განვიხილოთ გამოსახულება:

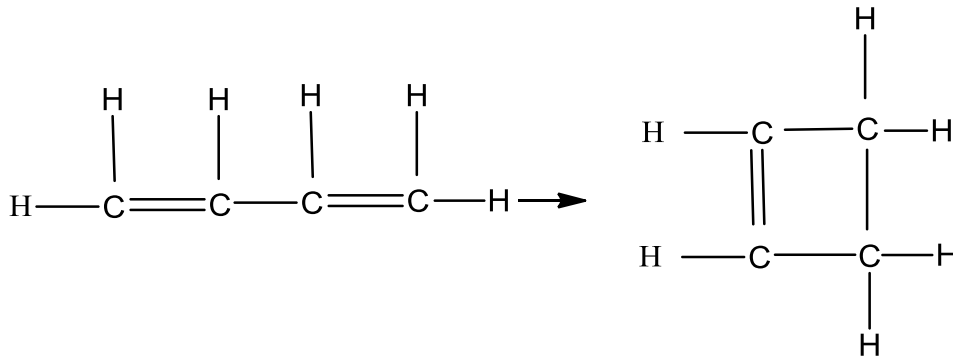
$$H_f = H_f - H_i \quad 187$$

სადაც: H_f - საბოლოო სისტემის შესაბამისი შენონის ინფორმაციის ენტროპიაა; H_i - საწყისი სისტემის შესაბამისი შენონის ინფორმაციის ენტროპია; H_f - ინფორმაციის ენტროპიის ცვლილება რეაქციის შედეგად.

აღმოჩნდა, რომ აცეტილენის ტრიმერიზაციის (179) რეაქცია მიმდინარეობს სისტემის ინფორმაციის ენტროპიის ზრდით ($H_r > 0$), ამგვარად, სისტემის ინფორმატიულობა იზრდება. აცეტილენის ციკლოტრიმერიზაციის პროცესისასთვის, სისტემის ინფორმაციის ენტროპია არ იცვლება ($H_r = 0$). ამგვარად, სისტემის ინფორმატიულობა უცვლელი რჩება.

ელექტროციკლური რეაქციების ალგებრული დახასიათება რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [151].

ელექტროციკლური რეაქციები განვიხილოთ დივინილის ციკლობუტენად ელექტროციკლიზაციის მაგალითზე:



188

ამ პროცესის მატრიცული ჩანაწერია:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 6 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 6 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 6 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 6 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

189

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

$$\Delta_r = 32 > 0 \quad 190$$

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

ელიმინირების რეაქციების შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [152-154].

განვიხილოთ რადიკალური ელიმინირების პროცესი



შემფოთების თეორია წარმატებით გამოიყენება ქიმიური რეაქციების ქვანტურ თეორიაში. შემფოთების ენერგია ტოლია:

$$\Delta E = \sum_k^{\text{დაკ}} C_{ry}^2 C_{sk}^2 \beta_{rs}^2 / \alpha_\gamma - \alpha_k - \sum_k^{\text{ვაკ}} C_{ry}^2 C_{sk}^2 \beta_{rs}^2 / \alpha_\gamma - \alpha_k \quad 192$$

სადაც: „დაკ“ - ნიშნავს დაკავებულ მოლეკულურ ორბიტალებს; „ვაკ“ - ნიშნავს ვაკანტურ მოლეკულურ ორბიტალებს; C_{ry} და C_{sk} ატომური ორბიტალების წინა კოეფიციენტებია; β - რეზონანსის ინტეგრალია; α_γ და α_k კულონის ინტეგრალები.

პროფ. მ. გვერდწითელის და რ. ჩიქვინიძის მიერ გამოთვლილი და ცხრილი 39-ში მოყვანილია ΔE - ს მნიშვნელობები (191) პროცესებისათვის და $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ მნიშვნელობები RCl-თვის. RCl-სათვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:



სადაც: $\text{X} \equiv \text{R}$, $\text{Y} \equiv \text{Cl}$

ცხრილი 39. რადიკალური ელიმინირების რეაქციებისთვის ენერგიების და ტოპოლოგიური ინდექსების მნიშვნელობები

R	$\Delta E, \text{ev}$	$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$
CH ₃	1,379	2,18
C ₂ H ₅	1,404	2,46
i- C ₃ H ₇	1,494	2,63
i - C ₄ H ₉	1,496	2,75

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

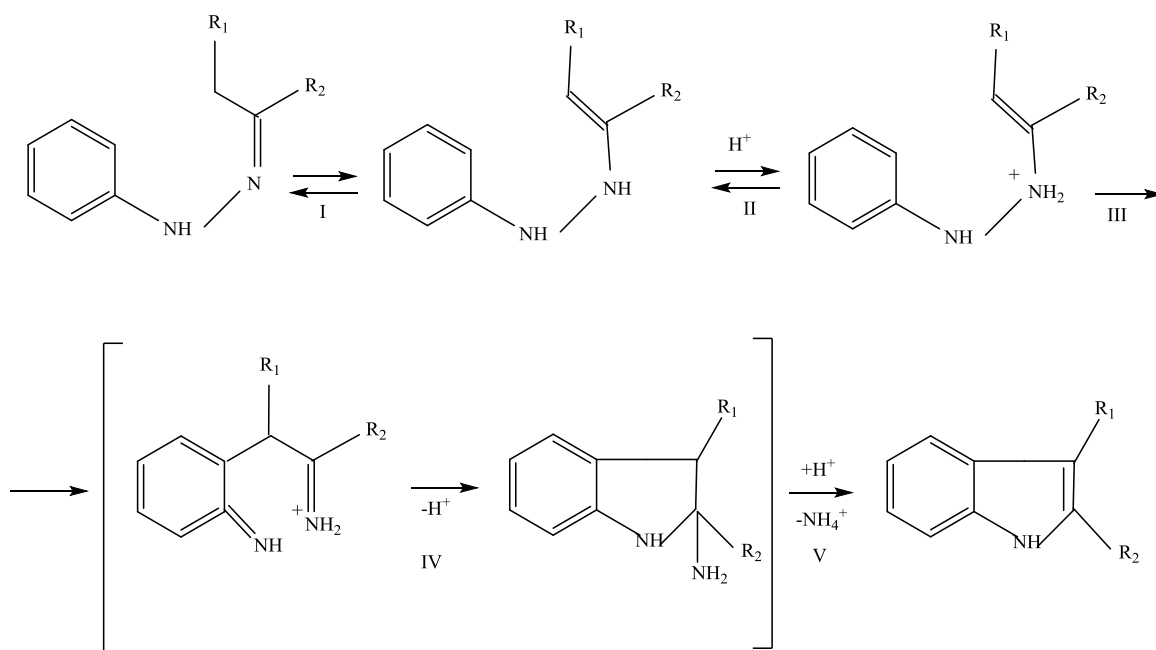
$$\Delta E = 0,256 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 0,821 \quad 194$$

კორელაციის r კოეფიციენტი შესაბამისად ტოლია 0,994. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით, ადგილი აქვს ბრწყინვალე კორელაციას.

მაგალითზე, ალგებრული ქიმიის ფარგლებში, რნზ და ქვაზი-რნზ მატრიცების მეთოდის გამოყენებით შესწავლილია ე. ფიშერის რეაქციის მექანიზმის საკვანძო სტადიები.

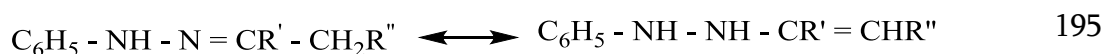
2- ჩანაცვლებული ინდოლების სინთეზის ერთ-ერთი საუკეთესო მეთოდია ე. ფიშერის მეთოდი [155,156]. ამ რეაქციის დღეისთვის აღიარებული ზოგადი მექანიზმი წარმოდგენილია სქემა 1-ზე.

შესწავლილია ფიშერის რეაქციის ორი უმნიშვნელოვანესი სტადია ქვაზი-რნზ მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.

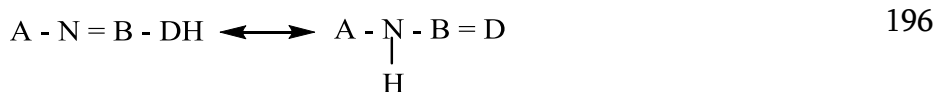


სქემა 1. 2- ჩანაცვლებული ინდოლების სინთეზის ე. ფიშერის მეთოდი.

პირველი მნიშვნელოვანი სტადიაა ჰიდრაზონული ფორმის გადაჯგუფება ენჰიდრაზინულ ფორმაში:



შემუშავებულია მოდელი:

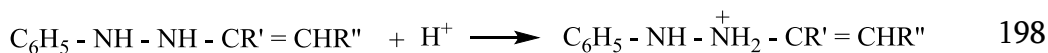


სადაც A შეესაბამება C₆H₅-NH, B – CR' და D- CHR'' .

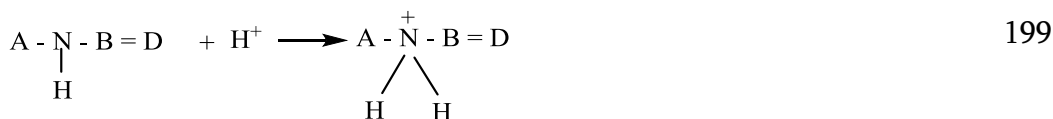
ამ პროცესის ალგებრულ-ქიმიურ ჩანაწერს გააჩნია სახე :

$$\left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 7 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & Z_B & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & Z_D & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right\| \rightarrow \left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & Z_B & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & Z_D & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right\| \quad 197$$

ფიშერის რეაქციის მეორე მნიშვნელოვანი სტადიაა ენჰიდრაზინის პროტონირების პროცესი:



შემუშავებულია მოდელი :



რომლის ალგებრულ-ქიმიურ ჩანაწერს გააჩნია სახე:

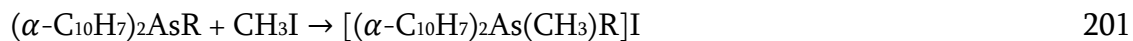
$$\left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 7 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & Z_B & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & Z_D & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right\| \rightarrow \left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 7 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & Z_B & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & Z_D & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right\| \quad 200$$

გამოთვლები ჩატარებულია უმარტივესი შემთხვევისთვის :

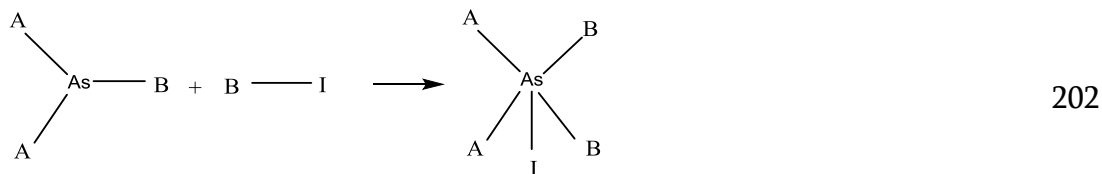
$$R' = R'' = H$$

განვიხილოთ გამოსახულება: $\Delta r = \Delta f - \Delta i$, სადაც Δi რეაგენტის შესაბამისი ქვაზი-რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა, Δf - რეაქციის პროდუქტის, Δr - დეტერმინანტის მნიშვნელობის ცვლილება რეაქციის შემდეგ. აღმოჩნდა, რომ ფიშერის რეაქციის ორივე შესწავლილი სტადიისთვის $\Delta r > 0$. თუ გავითვალისწინებთ, რომ Δ - ს მნიშვნელობა ახასიათებს ე.წ. „მოლეკულის სირთულეს“ (რანდიჩი), შეგვიძლია დავასკვნათ მხოლოდ ის, რომ ეს სტადიები დაკავშირებულია სისტემის სირთულის ზრდასთან.

ქვაზი-რნბ-მატრიცის მეთოდის ფარგლებში [157] შესწავლილია მეთილდი - (α -ნაფთილ) ალკილარსონიუმის იოდიდების სინთეზის შემდეგი რეაქცია



(201) რეაქციისათვის შევიმუშავეთ მარტივი მოდელი



სადაც A - შეესაბამება $\alpha\text{-C}_{10}\text{H}_7$ -ს; B - CH_3 -ს.

ამ პროცესის ჩანაწერს რნბ-მატრიცების გამოყენებით, შემდეგი სახე გააჩნია:

$$\left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 33 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & Z_B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Z_B & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 53 \end{array} \right\| \rightarrow \left\| \begin{array}{cccccc} Z_A & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & Z_A & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 33 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & Z_B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & Z_B & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 53 \end{array} \right\| \quad 203$$

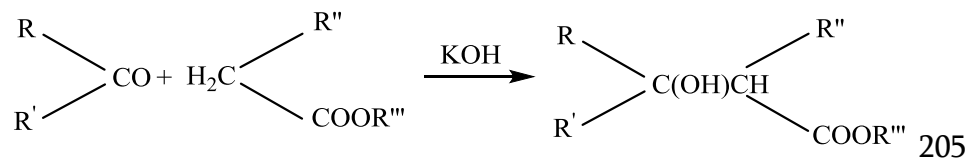
სადაც: 33 - დარიშხანის რიგობრივი ნომერია, 53 - იოდის რიგობრივი ნომერი. განვიხილოთ გამოსახულება:

$$\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i \quad 204$$

სადაც Δ_f - რეაქციის პროდუქტის შესაბამისი (რნბ)-მატრიცის დეტერმინანტია; Δ_i - რეაგენტის შესაბამისი (რნბ)-მატრიცის დეტერმინანტი; Δ_r - დეტერმინანტი მნიშვნელობის ცვლილება რეაქციის პროცესში.

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ $\Delta_r > 0$. რადგან Δ შეიძლება განვიხილოთ, როგორც მოლეკულის სტრუქტურული სირთულის მახასიათებელი პარამეტრი, შეიძლება დავასკვნათ, რომ (202) რეაქცია დაკავშირებულია სისტემის სირთულის ზრდასთან.

ქართველმა ქიმიკოსმა ა. გახოკიძემ აღმოაჩინა კეტონების და რთული ეთერების კონდენსაციის ახალი რეაქცია, რომელიც მიმდინარეობს კალიუმის ჰიდროქსიდის თანაობისას .

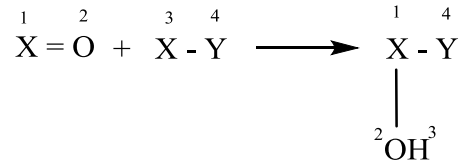


ეს პროცესი შესწავლილია ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის გამოყენებით [158]. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულის ცალკეულ სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ატომების რიგობრივი ნომრების

ჯამი, არადიაგონალური ელემენტებია ამ ფრაგმენტებს შორის არსებულ ქიმიურ ბმათა ჯერადობა .

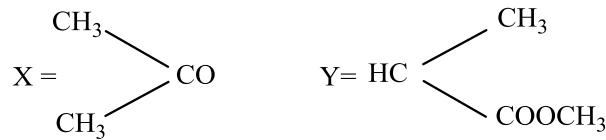
სიმარტივისთვის დავუშვათ, რომ $R = R^I = R^{II} = R^{III} = CH_3$. მაშინ (205)

პროცესის მოდელური სქემა მიიღებს მარტივ სახეს:



206

სადაც:



მოდელური რეაქციის ჩანაწერს ქვაზი-რნბ-მატრიცების საშუალებით გააჩნია სახე:

$$\left\| \begin{array}{cccc} Z_X & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & Z_Y \end{array} \right\| \rightarrow \left\| \begin{array}{cccc} Z_X & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 8 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & Z_Y \end{array} \right\|$$

207

განვიხილოთ გამოსახულება: $\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i$, სადაც: Δ_f – რეაქციის პროდუქტის შესაბამისი ქვაზი-რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა, Δ_i – საწყისი რეაგენტების, Δ_r – დეტერმინანტის მნიშვნელობის ცვლილება რეაქციის შედეგად. გამოთვლებმა აჩვენა, რომ $\Delta_r < 0$. თუ გავითვალისწინებთ, რომ Δ_r -ის მნიშვნელობა შეიძლება განვიხილოთ მოლეკულის სირთულის კრიტერიუმად, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ამ რეაქციის შედეგად სისტემის "სირთულე" მცირდება.

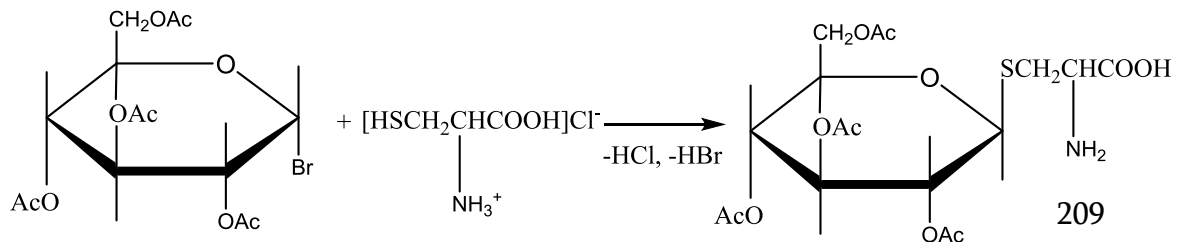
შენონის ინფორმაციის ენტროპია განისაზღვრება ფორმულით :

$$H = - \sum_{i=1}^n P_i \log_2 P_i \quad 208$$

სადაც P_i - გარკვეული ცდომილების ალბათობაა. ამ მიდგომის მოდერნიზაციის და გამოყენების შედეგად (208) გარდაქმნისთვის აღმოჩნდა, რომ ამ რეაქციის დროს შენონის ინფორმაციის ენტროპიაც მცირდება (ე.ი. მიიღება ინფორმაციულად ნაკლებადტევადი სისტემა).

თეორიულად შესწავლილია აცეტობრომგლუკოზის კონდენსაციით L-ცისტეინთან 1-S-ცისტეილაცეტოგლუკოზის მიღების რეაქცია ქვაზი-რნზ-მატრიცების მეთოდის გამოყენებით [159].

1-S-ცისტეილაცეტოგლუკოზა მიიღება აცეტობრომგლუკოზის კონდენსაციით L-ცისტეინჰიდროქლორიდთან (209) :



მოლეკულებისა და მათი გარდაქმნების თეორიულად შესასწავლად ალგებრულ ქიმიაში ფართოდ გამოიყენება მოლეკულური გრაფების თანაზიარობის მატრიცები და მათი მრავალრიცხოვანი მოდიფიკაციები. მატრიცათა აღნიშნულ კლასს მიეკუთვნება ქვაზი-რნზ-მატრიცებიც, რომელთა დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალ ატომთა რიგობრივი ნომერი ან მოლეკულათა ცალკეულ ფრაგმენტში შემავალ ატომთა რიგობრივ ნომერთა ჯამი, არადიაგონალური ელემენტებია - ქიმიურ ბმათა ჯერადობა .

(209) პროცესისთვის შემუშავებულია შემდეგი მარტივი მოდელი:



სადაც X - აღნიშნავს მონოსაქარიდის მოლეკულას ბრომის გარეშე, Y - ამინომჟავის მოლეკულას HS ჯგუფის წყალბადის გარეშე. (210) პროცესის ალგებრულ ჩანაწერს ქვაზი-რნზ-მატრიცების საშუალებით გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_X & 1 & 0 & 0 \\ 1 & Z_{Br} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Z_H & 1 \\ 0 & 0 & 1 & Z_Y \end{vmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix} Z_X & 1 & 0 & 0 \\ 0 & Z_{Br} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & Z_H & 0 \\ 1 & 0 & 0 & Z_Y \end{vmatrix} \quad 211$$

სადაც $Z_X = \sum Z_X$, $Z_Y = \sum Z_Y$, $Z_{Br} = 35$, $Z_H = 1$.

განვიხილოთ გამოსახულება

$$\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i \quad 212$$

სადაც Δ_f - საბოლოო სისტემის ქვაზი-რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა; Δ_i - საწყისი სისტემის ქვაზი-რნბ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობაა; Δ_r - დეტერმინანტის მნიშვნელობის ცვლილება (211) გარდაქმნის შედეგად.

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ $\Delta_r > 0$, რაც წარმოადგენს ამ პროცესის ალგებრულ-ქიმიურ კრიტერიუმს რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში და მიუთითებს, რომ (211) გარდაქმნის შედეგად სისტემის "სტრუქტურული სირთულე" იზრდება.

ალგებრული ქიმიის ფარგლებში, რნბ, ქვაზი-რნბ, ფსევდო-რნბ მატრიცების მეთოდის გამოყენებით, შესწავლილია იზომერიზაციის [160-162], ტაუტომერიის [163,164], გადაჯგუფების რეაქციები [165,166], რომელთა შორის მნიშვნელოვანია ბეკმანის [167], არბუზოვის [168], ფავორსკის [169], კრებსის ციკლის [170-172], ზელინსკის [173] გადაჯგუფებები.

ამრიგად, როგორც ვნახეთ, რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის გამოყენება პერსპექტიულია როგორც ტიპიური ორგანული ნივთიერებისათვის და მათი გარდაქმნებისათვის, ასევე კოორდინაციული ნაერთებისათვისაც. ამ მიმართულებით კვლევა ინტენსიურად გრძელდება.

1.4. ორგანული რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის ალგებრული შეფასება

კონსტრუირებულ იქნა ქიმიური რეაქციების მიმდინარეობის სტრუქტურული სირთულის ალგებრული მოდელი [174-180]. იგი ბმების გადანაწილების ოთხ, ახალ ლოკალურ მახასიათებელს აერთიანებს. ესენია:

1. ცალკეულ ბმათა ჯერადობის ცვლილების სირთულის ინდექსი - χ . იგი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$\chi = \sqrt{|v|(|v| + \delta)} \quad 213$$

$|r|$ -კონკრეტული ბმის ჯერადობის ცვლილების აბსოლუტურ მნიშვნელობას ასახავს, ხოლო δ პარამეტრი კი - ბმის ჯერადობის ცვლილების პროცესში არმონაწილე, (ე.წ. დამატებითი) ბმების რიცხვს.

2. სპეციფიკური სარეაქციო ცენტრის ფორმალური ელექტრონული კონფიგურაციის ცვლილების სირთულის ინდექსი - χ^0 . იგი ბმების გადანაწილების პროცესში მონაწილე სპეციფიკური სარეაქციო ცენტრების თავისუფალი ელექტრონული წყვილების რაოდენობრივი ცვლილების ალგებრულ დახასიათებას ისახავს მიზნად. იგი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$\chi^0 = \sqrt{r(r + \ell_p)} \quad 214$$

r -მახასიათებელი, ფორმალურ-ლოგიკური მიდგომის ფარგლებში, სარეაქციო ცენტრის ფორმალური ქცევის ტიპობრივი იდენტიფიცირების მიზნით იქნა შემოტანილი. მისი მნიშვნელობა საწყის და საბოლოო ქიმიურ სისტემაში კონკრეტული სარეაქციო ცენტრის ვალენტობათა სხვაობის აბსოლუტური მნიშვნელობის ტოლია. რაც შეეხება ℓ_p , იგი რეაქციაში გამოუყენებელი თავისუფალი ელექტრონული წყვილების რიცხვს განსაზღვრავს.

3. ჩვეულებრივი სარეაქციო ცენტრის სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსი - CI გამოითვლება ფორმულით:

$$CI = \sum_{i=1}^p \chi_i \quad 215$$

4. სპეციფიკური სარეაქციო ცენტრის სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსი - CI^0 . მისი კონსტრუირებისას, სარეაქციო ცენტრის ინციდენტური ბმების ჯერადობის ცვლილების სირთულის ინდექსების და პარალელურად გათვალისწინებულ იქნა აგრეთვე სპეციფიკური სარეაქციო ცენტრის ფორმალური ელექტრონული კონფიგურაციის ცვლილების სირთულის ინდექსი. CI^0 შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$CI^0 = \sum_{i=1}^p \chi_i + \chi^0 \quad 216$$

ორგანული რეაქციების პროცესში მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების ალგებრულად აღწერის მიზნით არსებული მოდელის ფარგლებში შემუშავებულ იქნა ბმების გადანაწილების სირთულის მატრიცა. მასში დიაგონალურ ელემენტებს სარეაქციო ცენტრების სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსები შეადგენენ, არადიაგონალურ ელემენტებს – სარეაქციო ცენტრებს შორის ბმების ჯერადობის ცვლილების სირთულის ინდექსები.

ცხრილი 40. ჰიდრაზონსა და თიანოლქლორიდს შორის ურთიერთქმედების რეაქციის ბმების გადანაწილების სირთულის მატრიცა

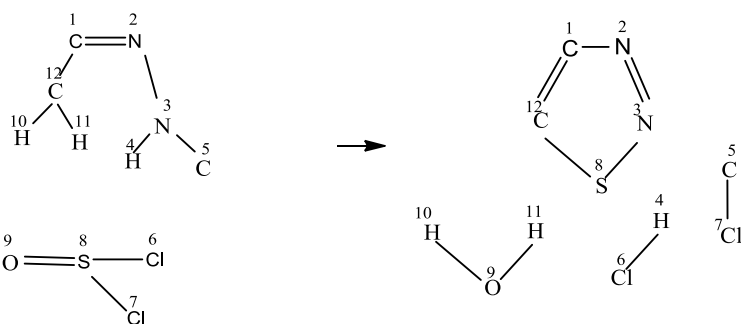
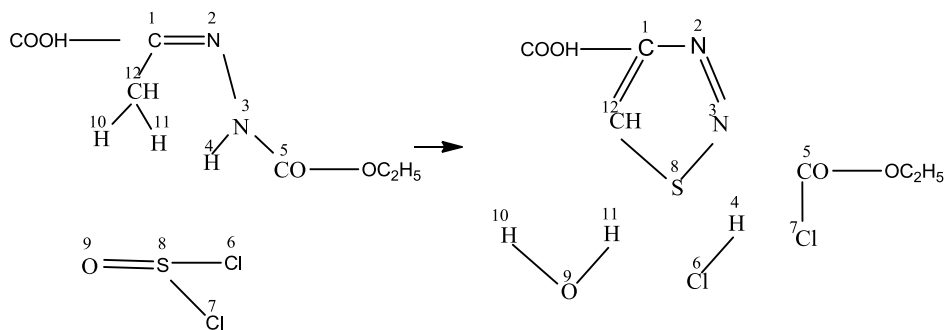
	C ¹	N ²	N ³	H ⁴	C ⁵	Cl ⁶	Cl ⁷	S ⁸	O ⁹	H ¹⁰	H ¹¹	C ¹²
C ¹	2,82	1,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,41
N ²	1,41	2,82	1,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N ³	0	1,41	1,41	1	1	0	0	1	0	0	0	0
H ⁴	0	0	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0
C ⁵	0	0	1	0	2	0	1	0	0	0	0	0
Cl ⁶	0	0	0	1	0	2	0	1	0	0	0	0
Cl ⁷	0	0	0	0	1	0	2	0	1	0	0	0
S ⁸	0	0	1	0	0	1	1	8,45	2	0	0	1
O ⁹	0	0	0	0	0	0	0	2	4	1	1	0
H ¹⁰	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	0	1
H ¹¹	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	2	1
C ¹²	1,41	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	4,41

სქემა 2-ზე განხილულია ჰიდრაზონსა და თიანოლქლორიდს შორის ურთიერთქმედების რეაქციის შესაბამისი ქიმიური, სარეაქციო და სიმბოლური განტოლებების ნუსხა. მოყვანილია ბმების გადანაწილების სირთულის მატრიცა.

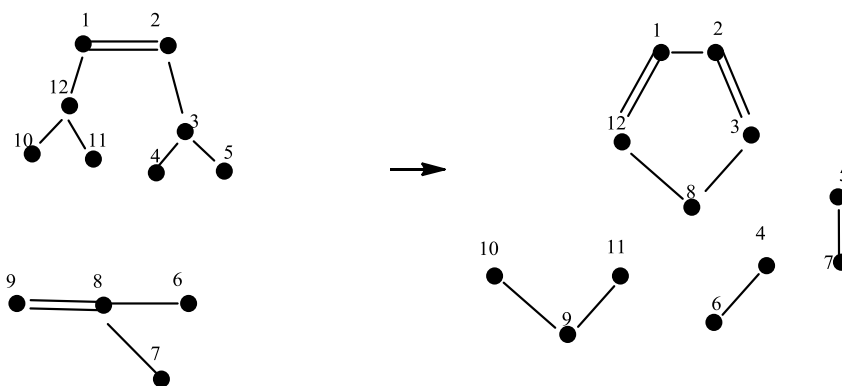
ალგებრული მოდელის ფარგლებში შემოტანილი იქნა სარეაქციო ცენტრის სირთულის კოდის ცნება. მასში პირველ ელემენტს სარეაქციო ცენტრის ფორმალური ელექტრონული კონფიგურაციის ცვლილების

ინდექსის - χ^0 მნიშვნელობა შეადგენს, დანარჩენ ელემენტებს- მასთან ინციდენტური ρ -რაოდენობა ბმების ჯერადობის ცვლილების სირთულის ინდექსების მნიშვნელობები. კოდს შემდეგი სახე გააჩნია:

$$(\chi^0, \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_p), \chi_1 \geq \chi_2 \geq \dots, \geq \chi_p \quad 218$$



217



სქემა 2. ჰიდრაზონსა და თიანოლქლორიდს შორის ურთიერთქმედების რეაქციის შესაბამისი ქიმიური, სარეაქციო და სიმბოლური განტოლებები.

ორი /ან რამდენიმე/ სარეაქციო ცენტრი ჩაითვლება ექვივალენტური სტრუქტურული ქცევის მქონე ცენტრებად იმ შემთხვევაში, თუ მათი სირთულის კოდები ემთხვევა ერთმანეთს. ექვივალენტური სტრუქტურული ქცევის მქონე სარეაქციო ცენტრების გამაერთიანებელ სიმრავლეს ექვივალენტობის კლასი ეწოდება.

სარეაქციო ცენტრების სტრუქტურული ქცევის სირთულისა და ქცევის სირთულის კოდის კონსტრუქციებზე დაყრდნობით ავტორის მიერ აგებულ

იქნა ბმების გადანაწილების სტრუქტურული სირთულის ინდექსი - BC. მის კონსტრუირებას შენონის ფორმულა დაედო საფუძვლად. BC ინდექსი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$BC = 2CC \cdot \log_2 CC - \sum_{i=1}^n CC_i \cdot \log_2 CC_i \quad 219$$

CC - პარამეტრი რეაქციაში მონაწილე სარეაქციო ცენტრების სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსების ჯამურ რიცხვს წარმოადგენს, CC_i - კი i-ურ ექვივალენტობის კლასში გაერთიანებულ სარეაქციო ცენტრების სტრუქტურული ქცევის სირთულის ინდექსების ჯამურ რიცხვს განსაზღვრავს.

ალგებრული მოდელის ფარგლებში BC ინდექსის მოდიფიცირების საფუძველზე კონსტრუირებულ იქნა ქიმიური რეაქციის მიმდინარეობის სტრუქტურული სირთულის ინდექსი RC. მისი აგებისას, ბმების გადანაწილების სტრუქტურული სირთულის ხარისხის გათვალისწინების და პარალელურად, ყურადღება მიექცა სარეაქციო ცენტრების ქიმიურ ბუნებას / რაც უფრო მეტი ქიმიურად განსხვავებული ატომი იღებს მონაწილეობას რეაქციაში, მით უფრო რთულია იგი/. RC ინდექსი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$RC = BC + TC \quad 220$$

სადაც:

$$TC = E \cdot \log_2 E - \sum_{i=1}^n E_i \cdot \log_2 E_i \quad 221$$

E - რეაქციაში მონაწილე ატომების რიცხვს განსაზღვრავს, ხოლო E_i - i-ურ ექვივალენტობის კლასში გაერთიანებული ატომების რიცხვს. როგორც BC და RC ინდექსების თეორიულმა შესწავლამ ცხადყო, ისინი ხშირ შემთხვევაში კარგად კორელირებენ მიზნობრივ ნაერთთა გამოსავლიანობებთან და სინთეზის წარმადობის შემფასებელ რაოდენობრივ კრიტერიუმად შეიძლება იქნენ მიჩნეულნი. კერძოდ, დადგინდა, რომ ორგანული ნაერთის რამდენიმე

ალტერნატიული სინთეზის ვარიანტის შემთხვევაში, მათი მნიშვნელობები უკუპროპორციულ დამოკიდებულებაში იმყოფებიან მიზნობრივი ნაერთის გამოსავლის მნიშვნელობებთან. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ყველაზე მაღალი გამოსავლით მიმდინარე სინთეზს ყველაზე დაბალი BC და RC ინდექსების მნიშვნელობები შეესატყვისება, ხოლო დაბალი გამოსავლით მიმდინარე სინთეზს კი - BC და RC ინდექსების მაღალი მნიშვნელობები.

ორგანულ ნაერთთა სტრუქტურული სირთულის MC ინდექსის ალგებრულად დახასიათების მიზნით არსებული მიდგომის ფარგლებში კონსტრუირებულ იქნა ორ- და სამცენტრიანი საწყისი სარეაქციო სისტემების სირთულის ინდექსები DC და TC. მათ გამოსათვლელი ფორმულებია:

$$DC = \ln \sum_{i=1}^d RCD_i \quad 222$$

$$TC = \ln \sum_{i=1}^d RCT_i \quad 223$$

d და t პარამეტრები შესაბამისად ორ- და სამცენტრიანი საწყისი სარეაქციო სისტემების ფარგლებში თეორიულად დასაშვებ გარდაქმნათა რიცხვებს განსაზღვრავენ, ხოლო RCD და RCT პარამეტრები ორ- და სამცენტრიანი შიდამოლეკულური გარდაქმნების მიმდინარეობის სტრუქტურული სირთულის ინდექსების რიცხვით მნიშვნელობებს. DC და TC ინდექსების გამოყენების საფუძველზე შემუშავებულია ორგანულ ნაერთთა სტრუქტურული სირთულის ინდექსის გამოსათვლელი ფორმულა:

$$MC = 2(DC + TC) \log_2(DC + TC) \sum_i^D C_i \log_2 DC_i - \sum_j^T C_j \log_2 TC_j \quad 224$$

ფორმულაში DC და TC სიმბოლოებით შესაბამისად აღნიშნულია ორ- და სამცენტრიანი საწყისი სარეაქციო სისტემების სირთულის ჯამური მნიშვნელობები, ხოლო DC_i და TC_j სიმბოლოებით -i -ურ და j-ურ ექვივალენტობის კლასებში გაერთიანებული, სტრუქტურულად იდენტური

ორ- და სამცენტრიანი საწყისი სარეაქციო სისტემების სირთულის ჯამური მნიშვნელობები.

ორგანულ ნაერთთა სტრუქტურული სირთულის ფორმალურ-ლოგიკური მოდელის ფარგლებში შემუშავებული იქნა მრავალსტადიანი სინთეზების წარმადობის რაოდენობრივი შეფასების კიდევ ერთი მეთოდი. ამჯერად მიზნობრივი ნაერთის გამოსავლის პროგნოზირებისას გადამწყვეტი მნიშვნელობა მიენიჭა ამოსავალ /MC₀/ და თითოეულ სტადიაზე წარმოქმნილ ნაერთთა სტრუქტურული სირთულის მნიშვნელობებს /MC_i/, რომელთა ჯამიც სინთეზის სირთულის ალგებრულ მახასიათებლად იქნა მიჩნეული /SC/.

$$SC = \sum_{i=1}^{s-1} MC_i + MC_0 \quad 225$$

S - სტადიების რიცხვია. როგორც SC - ინდექსის თეორიულმა შესწავლამ ცხადყო, რამდენიმე ალტერნატიული სინთეზის შემთხვევაში იგი მიზნობრივი ნაერთის გამოსავლის ზრდის უკუპროპორციულად იცვლება.

ორგანულ ნაერთთა სისტემატიზაციისა და იდენტიფიკაციის მიზნით შემუშავებული იქნა მოლეკულების სტრუქტურის ჩაწერის ფორმალური მეთოდი. მის ფარგლებში მოლეკულა თეორიულად დასაშვები n - ცენტრიანი /n>1/ ციკლური ელექტრონული გადატანით მიმდინარე გარდაქმნების ტიპების გამაერთიანებელი სიმრავლის, ე.წ. შიდამოლეკულური გარდაქმნების ოჯახის სახით არის წარმოდგენილი:

$$A_n B_n C_n D_n E_n F_n G_n H_n I_n \quad 226$$

A, B, C, D, E, F, G, H სიმბოლოებით შესაბამისად აღნიშნულია დისმუტაციის, მიერთების /ოლიგომიერთების/, ფრაგმენტაციის /ოლიგოფრაგმენტაციის/, ციკლომიერთების /ოლიგოციკლომიერთების/, ციკლოფრაგმენტაციის /ოლიგოციკლოფრაგმენტაციის/, გადაჯგუფების /იზომერიზაციის/, ელექტროციკლიზაციისა და ელექტრორეციკლიზაციის რეაქციები. I - სიმბოლოთი აღნიშნულია რეზონანსი.

მიღებულია შემდეგი ძირითადი შედეგები:

1. ნახშირბადატომების ფრაგმენტების დასაშვები ტიპების განხილვის საფუძველზე შემუშავებულია ნახშირწყალბადთა სტრუქტურული იზომერების ოჯახებად კლასიფიკაციის ფორმალურ-ლოგიკური მოდელი.

2. შემუშავებულია ნახშირწყალბადთა ოჯახების ჩამოთვლის ანალიზური და რეკურენტული მეთოდები.

3. ნახშირწყალბადთა ოჯახებად კლასიფიკაციის მოდელზე დაყრდნობით შემუშავებულია ჟანგბად- და აზოტშემცველ ორგანულ ნაერთთა იზომერების ოჯახებად სისტემატიზაციისა და რეკურენტული ჩამოთვლის მეთოდები.

4. გაანალიზებულია თანაზიარობის მატრიცის სამი ახალი სახესხვაობა:

ა) ელექტროუარყოფითობის და პოლარობის /ეპრ/;

ბ) რიგობრივი ნომრისა და ბმის ჯერადობის /რნბ/;

გ) ვალენტობის და ბმის ჯერადობის /ვბ/.

დადგენილია, რომ მათი დეტერმინანტები წარმოქმნიან ახალი ტოპოლოგიური ინდექსების ჯგუფს, რომლებიც შეიძლება გამოყენებული იქნენ „აღნაგობა-თვისება“ კორელაციის გამოსავლენად ორგანულ ნაერთთა ცალკეულ ჰომოლოგიურ რიგებში.

5. ვალენტობისა და ბმის ჯერადობის მატრიცის ფარგლებში შემუშავებულია ორგანულ ნაერთთა კლასიფიკაციის ალგებრული მოდელი. დადგენილია, რომ:

ა) აციკლურ ორგანულ ნაერთთა ვბ მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები ყოველთვის უდრის ნულს;

ბ) მხოლოდ ლუწი რაოდენობა ატომების შემცველ ერთი ან რამდენიმე მარტივი ციკლისაგან შემდგარ ორგანულ ნაერთთა ვბ მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები ყოველთვის უდრის ნულს;

გ) კენტი რაოდენობა ატომების შემცველ ერთი ან რამდენიმე მარტივი ციკლისაგან შემდგარ ორგანულ ნაერთთა ვბ მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები ყოველთვის განსხვავდება ნულისგან და უდრის $4m - ს / m = 1, 2, \dots /$.

6. პერიმეტრული კოდირების ფარგლებში შემუშავებულია კონდენსირებული პოლიციკლური ბენზოიდური ნახშირწყალბადების

ჩაწერის მეთოდი შესაბამისი პერიმეტრული გრაფის თანაზიარობის მატრიცის სახით.

7. პერიმეტრული გრაფის თანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტზე დაყრდნობით კონსტრუირებულია კონდენსირებული პოლიციკლური ბენზოიდური ნახშირწყალბადების კანცეროგენული აქტივობის პროგნოზირების მატრიცული მოდელი. ამასთანავე, შემუშავებულია აღნიშნული ტიპის ნაერთთა თავისუფალ რადიკალებთან ურთიერთქმედების დროს სარეაქციო ცენტრის პროგნოზირების მატრიცული მოდელი. დადგენილია, რომ პერიმეტრული გრაფის ქვეგრაფების თანაზიარობის მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები, უმეტეს შემთხვევაში, უკუპროპორციულ დამოკიდებულებაში იმყოფებიან თავისუფალი ვალენტობის ინდექსის $/Fr/$ მნიშვნელობებთან.

8. აგებულია რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის ალგებრული მეთოდი. დასადგენია, რომ მის ფარგლებში კონსტრუირებული რეაქციის სტრუქტურული სირთულის ინდექსი - RC შეიძლება მიჩნეულ იქნეს მრავალსტადიანი სინთეზების წარმადობის შემფასებელ კრიტერიუმად.

9. რეაქციის დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის ალგებრული მოდელის ფარგლებში ჩატარებულია: ა) მადელუნგის, ბ) ფიშერის, გ) ბიშლერის, დ) ვერმანის, ე) მაიერის, ვ) ფშორისა და ზ) რაისერტის მეთოდებით ინდოლისა და მისი ნაწარმების სინთეზის ფორმალურ-ლოგიკური ანალიზი. დადგენილია, რომ აღნიშნული სინთეზური სქემების შესატყვისი სტრუქტურული სირთულის ინდექსების სიდიდეები უკუპროპორციულ დამოკიდებულებაში იმყოფებიან მიზნობრივი ნაერთის პროცენტული გამოსავლის მნიშვნელობებთან.

10. რეაქციების დროს მიმდინარე სტრუქტურული ცვლილებების სირთულის რაოდენობრივი მოდელის ფარგლებში შემუშავებულია მოლეკულური სირთულის შეფასების თეორიულ-ინფორმაციული მოდელი. მის ფარგლებში აგებულია მრავალსტადიანი სინთეზების ფარდობითი გამოსავლის შეფასების ადიტიური მეთოდი. მისი გამოყენებით ჩატარებულია

Z- ქასმონისა და 2,5-ბის-[1H]-ინდოლის ზოგიერთი სინთეზის ალგებრული ანალიზი.

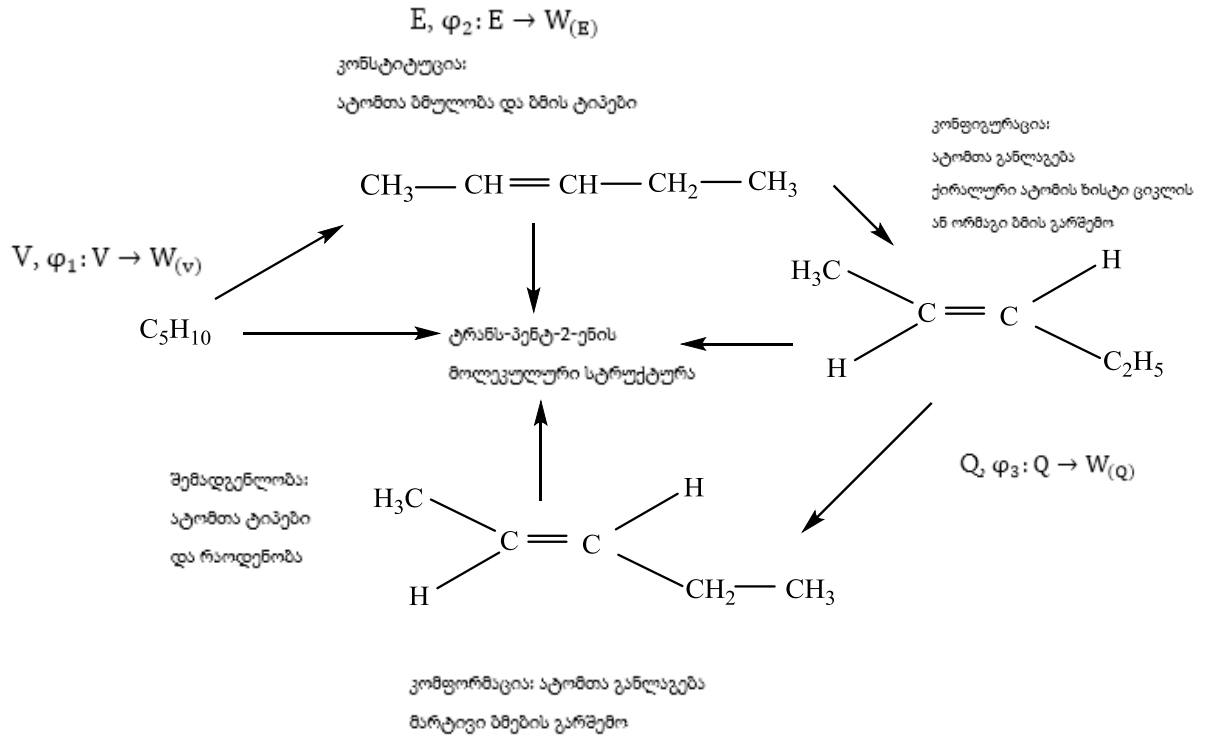
11. თეორიულად შესაძლო n- ცენტრიანი ციკლური ელექტრონული გადატანით მიმდინარე შიდამოლეკულური გარდაქმნების ალგებრული ფორმალიზაციის საფუძველზე შემუშავებულია ორგანულ ნაერთთა აღწერის ფორმალური მეთოდი.

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

ცნობილია, რომ გრაფების თეორიის შეზღუდულობა სტერეოსტრუქტურის მოდელირებისას გაპირობებულია მისი ინჰერენტული შეზღუდულობით [181-184]. ეს გამოწვეულია წვეროთა შორის მხოლოდ ერთი მიმართების – თანაზიარობის (ქიმიური თვალსაზრისით – ბმულობის) განხილვაში, მაშინ როდესაც მოლეკულის თვისებებს აპირობებს არა მხოლოდ ატომთა ბმულობა, არამედ სივრცეში მათი ურთიერთმდებარეობაც (სტრუქტურის ტოპოლოგია). სხვაგვარად: არა მხოლოდ შემადგენლობას და კონსტიტუციას, არამედ კონფიგურაციას და კონფორმაციას (სქემა 3).

აღწერილ მიმართებას ეწოდა "დისლოკაციის" მიმართება. ნაშრომში გ. ლეკიშვილის მიერ პირველად არის განსაზღვრული სტერეოიზომორფიზმის ცნება. ორი განზოგადებული გრაფი G_1 და G_2 სტერეოიზომორფულია მაშინ და მხოლოდ მაშინ, როცა მათი წვეროების V_1 და V_2 სიმრავლეებს შორის თანაზიარობის და დისლოკაციის დაცვით არსებობს ურთიერთცალსახა შესაბამისობა. იზომორფიზმის ცნების განზოგადებამ სტერეოგრაფებისთვის საშუალება მოგვცა, მოგვეხდინა ისეთი ტოპოლოგიური ინდექსების დიზაინი, რომელთაც არ გააჩნდათ გადაგვარება სივრცითი იზომერებისთვის, პირველად განისაზღვრა რა ტოპოლოგიური სტერეოინდექსი, როგორც რიცხვი, რომელიც იდენტურია მოცემული განზოგადებული გრაფის სტერეოიზომორფული ყოველი გრაფისთვის. ჩვენ მიერ კონსტრუირებული დესკრიპტორები დაფუძნებულია ჩვენნივე მეთოდით მოდიფიცირებულ

თანაზიარობის და დისტანციის მატრიცებზე. თანაზიარობის მატრიცა, გრაფთა უმნიშვნელოვანესი რეპრეზენტაცია, მოლეკულურ გრაფთა სივრცითი თავისებურებების აღწერის მიზნით ჩვენ მიერ განზოგადდა კომპლექსური რიცხვების გამოყენებით.



სქემა 3. ტრანს-პენტ-2-ენის ერთ-ერთი კონფორმერის შემადგენლობა, კონსტიტუცია, კონფიგურაცია, კონფორმაცია. აწონილი გრაფი $H=[V,E, \varphi_1, \varphi_2, W^{(V)}, W^{(E)}]$ წარმოადგენს მხოლოდ შემადგენლობას და კონსტიტუციას. მასში არ არის გათვალისწინებული მათემატიკური ობიექტი სივრცითი აღნაგობის დასაფიქსირებლად. V არის წვეროთა, ხოლო E წიბოთა - სიმრავლე; φ_1 და φ_2 წარმოადგენენ მათ სიურექტიულ ასახვას $W^{(V)}$ და $W^{(E)}$ წონების სიმრავლეებზე.

ამრიგად, თანაზიარობის მატრიცაში პირველად აისახა მოლეკულათა სივრცითი აღნაგობა. მატრიცის არადიაგონალური წევრები განისაზღვრა, როგორც

$$\alpha_{kl} = \alpha_{kl} + i\beta_{kl} \tag{227}$$

სადაც

$$\alpha_{kl} = \begin{cases} \mu_{kl}, & \text{თუ } (k,l) \in E, \text{ ე. ი. თუ } k \text{ და } l \text{ ატომები ბმულია;} \\ 0, & \text{სხვა შემთხვევაში.} \end{cases} \tag{228}$$

μ_{kl} წარმოადგენს (k,l) წიბოსათვის მინიჭებულ წონას.

$$\beta_{kl} \begin{cases} 1, & \text{თუ } (k, l) \in Q_c, & \text{ე.ი. } k \text{ და } l \text{ ატომები ცის - მდგომარეობაში და } d_{kl} = 3; \\ 1, & \text{თუ } (k, l) \in Q_t, & \text{ე.ი. } k \text{ და } l \text{ ატომები ტრანს - მდგომარეობაშია და } d_{kl} = 3; \\ 0, & & \text{სხვა შემთხვევაში} \end{cases} \quad 229$$

თუ k და l წვეროები $n \geq 1$ ძირითადი ქვეგრაფით (ე.ი. $d=3$ სიგრძის დისტანცია-ქვეგრაფით) არიან დაკავშირებული, მაშინ:

$$\beta_{kl} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \beta_{klj} \quad 230$$

განსაკუთრებით უნდა აღინიშნოს, რომ β_{kl} სიდიდეები არ არიან დამოკიდებული წვეროთა დანომვრის კონკრეტულ ხერხზე.

აღნიშნულ ნაშრომში განხილულია მოლეკულები აღნაგობის სივრცითი თავისებურებებით. მათი მოდიფიცირებული მატრიცების ყურადღებით შესწავლა ცხადჰყოფს, რომ ადგილი აქვს მოლეკულათა სივრცითი აღნაგობის კოდირებას. ამდენად, ჩვენ მიერ დამტკიცებულია, რომ Q სიმრავლე წარმოადგენს მოლეკულური სტრუქტურის სტერეოთავისებურებათა მათემატიკურ მოდელს.

რამდენადაც კონფიგურაციის ცნება მოიცავს ატომთა განლაგებას არა მხოლოდ ორმაგი ბმის ან ხისტი ციკლის, არამედ ასიმეტრიული ატომის გარშემოც, ქირალობის მოდელირებისთვის მოდიფიცირებული თანაზიარობის მატრიცის დიაგონალური ელემენტი ჩვენ განვსაზღვრეთ, როგორც $a_{kk} = \omega_{kk} + \beta_{kk}$ 231

სადაც ω_{kk} წვეროს ტოპოლოგიური წონაა, ხოლო

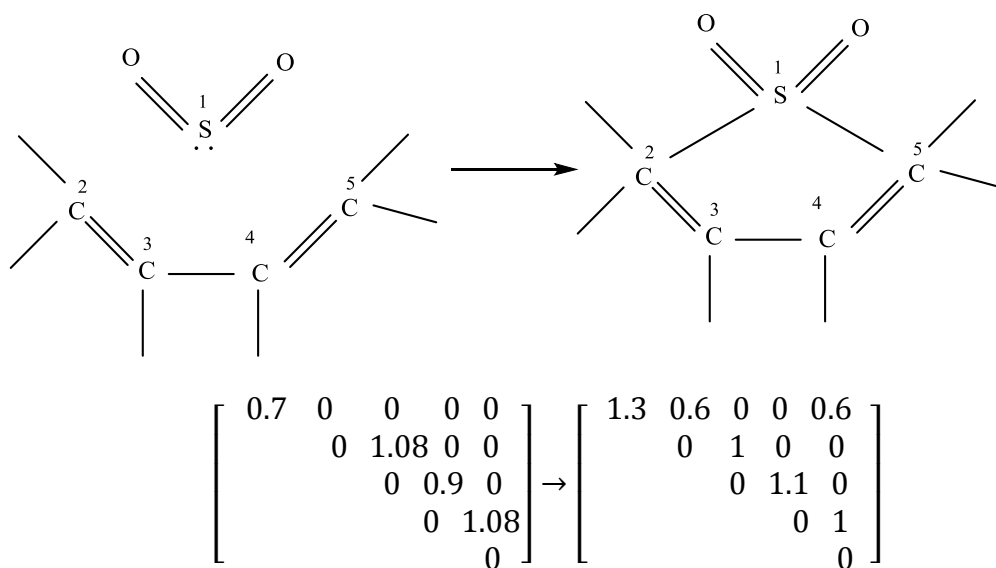
$$\beta_{kk} = \begin{cases} 1, & \text{თუ } k \text{ ატომი ქირალურია და მარჯვნივ მიბრუნებული;} \\ -1, & \text{თუ } k \text{ ატომი ქირალურია და მარცხნივ მიბრუნებული;} \\ 0, & \text{სხვა შემთხვევაში.} \end{cases} \quad 232$$

მოლეკულის აღნაგობის მათემატიკური მოდელირებისთვის საჭიროა $W^{(V)}$ და $W^{(E)}$ წონათა სიმრავლეების მართებული შერჩევა. ჩვენ მიერ შემოთავაზებულია კრიტერიუმთა სისტემა, რომელთა მეშვეობითაც უნდა მოხდეს წონათა ძიება: (i) შესაძლებელი იყოს არა მხოლოდ ჰეტეროატომების, არამედ მოლეკულაში შემავალი იონური და რადიკალური ფრაგმენტების წარმოდგენა, (ii) შეიძლებოდეს ერთი და იგივე პერიოდის ელემენტების ატომების განსხვავება, (iii) შესაძლებელი იყოს მრავალცენტრიანი და C-M ბმების წარმოდგენა, (iv) გააჩნდეთ მკაფიო ფიზიკური აზრი, დაკავშირებული

მოლეკულური აღნაგობის ელექტრონულ ბუნებასთან, (v) წონები უნდა იყოს: sp^3C ატომისთვის $\omega = 0$ ხოლო $(sp^3)C-(sp^3)C$ მარტივი ბმისთვის $\mu = 1$.

ზემოთთქმულის, აგრეთვე ქიმიურ გრაფთა თეორიის და ჰიუკელის მოლეკულური ორბიტალების (ჰმო) თეორიის ორგანული ნათესაობის (ტოპოლოგიური ბუნების) გათვალისწინებით ჩვენ მიერ იქნა ჰმო მოდელის კულონური h_x და რეზონანსული K_{xy} პარამეტრები. ნაჩვენებია, რომ მათი გამოყენება ეფექტურია არა მხოლოდ სტრუქტურათა კოდირების, არამედ მოდელირების განხორციელებისთვის.

აღსანიშნავია, რომ განზოგადებული გრაფის $H = \{V, E, Q, \phi_1 \phi_2, W^{(V)}, W^{(E)}\}$, როგორც მოლეკულის აბსტრაქტულ-მათემატიკური მოდელის გამოყენება შესაძლებელს ხდის მოდელირების ახალ, თვისობრივად უფრო მაღალ დონეზე წარმართვას. ნაჩვენებია, რომ კლასიკური გრაფები და ტოპოლოგიური ინდექსები წარმოადგენენ ახალი განზოგადებული (აბსტრაქტული) გრაფების და მათი ინვარიანტების კერძო შემთხვევას. ნაშრომში მითითებულია, რომ ეს საშუალებას იძლევა, არა მხოლოდ გათვალისწინებულ იქნას აღნაგობის სივრცითი თავისებურებები, არამედ გამოიკვეთოს მათი როლი მოცემულ თვისებაში, რისთვისაც საჭიროა, ჩატარდეს (i) მხოლოდ თანაზიარობის და (ii) თანაზიარობა-დისლოკაციის დონეებზე აგებული ინდექსებით გამოვლენილი კორელაციების ანალიზი.



სქემა 4. გოგირდის დიოქსიდის ციკლომიერთება ბუტადიენტან (H და O ატომები არაა გათვალისწინებული)

ნივთიერებათა აღნაგობის მათემატიკური დამუშავების წარმოდგენილი მეთოდი ნაერთთა ჰომოკონსტიტუციური და ამბივალენტური გარდაქმნების კოდირების საშუალებას იძლევა (სქემა 4).

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

ნამდვილ რიცხვთა სიმრავლიდან კომპლექსურ რიცხვთა სიმრავლეზე გადასვლა მნიშვნელოვნად აფართოებს მოლეკულური დესკრიპტორების აგებისა და გამოყენების არეალს სტრუქტურების სტერეოსპეციფიკის მათემატიკურ-ქიმიურად შესწავლის საქმეში.

აღნიშნული მიდგომის პოზიციიდან მოდიფიცირებულია ვინერის რიცხვი, როგორც:

$$W^{(i)} = 1/2 \sum_k^n \sum_l^n d_{kl}^i$$

233

სადაც: $d_{kl}^{(i)} = d_{kl} + i\beta_{kl}$,

ამასთან, შემოტანილია ვინერის რიცხვის ანალოგიური ინდექსი:

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

234

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

ეს ინდექსები საკმაოდ კარგად ასახავენ მოლეკულის სტერეოსტრუქტურულ სპეციფიკას.

2. შედეგები და მათი განსჯა

ჩვენს მიერ ჩატარებულია ზოგიერთი სისტემის მათემატიკურ-ქიმიური კვლევა.

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

ნორმალური ალკანებისათვის [185] პროფ. მ. გვერდწითელის, გ. ლეკვიშვილის და ნაშრომის ავტორის მიერ შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$X-Y \quad 235$$

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

შესატყვის $\Delta\tilde{r}n\tilde{b}$ - გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_x & 1 \\ 1 & Z_y \end{vmatrix}$$

236

ცხრილი 41-ში მოყვანილია $\lg(\Delta\tilde{r}n\tilde{b})$, Σ_{lomo}^{calc} და I_1^{exp} (ნაერთის იონიზაციის პირველი პოტენციალი) ნორმალური ალკანებისათვის.

ცხრილი 41 . ნორმალური ალკანებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსები იონიზაციის ენერგიები

ალკანი	$\lg(\Delta\tilde{r}n\tilde{b})$	Σ_{lomo}^{calc}, ev	I_1^{exp}, ev
C ₂ H ₆	1,90	12,21	11,76
C ₃ H ₈	2,18	11,22	11,21
C ₄ H ₁₀	2,35	10,72	10,80
C ₅ H ₁₂	2,47	10,55	10,55
C ₆ H ₁₄	2,57	10,41	10,43
C ₇ H ₁₆	2,64	10,33	10,35
C ₉ H ₂₀	2,77	(10,22)	(10,22)
C ₁₀ H ₂₂	2,82	10,18	10,19
C ₁₁ H ₂₄	2,86	(9,95)	(9,97)

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$\Sigma_{\text{lomo}}^{\text{calc}} = -2,18 \lg (\Delta_{(\text{რნბ})}) + 16,08 \quad 237$$

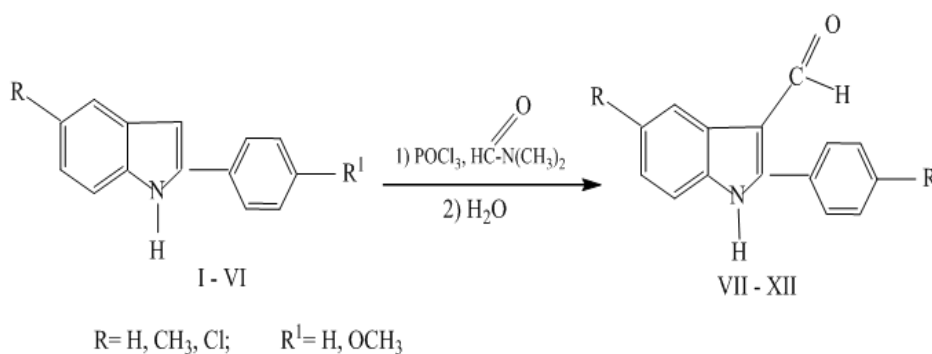
$$I_1^{\text{exp}} = -1,78 \lg (\Delta_{(\text{რნბ})}) + 15,0 \quad 238$$

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

$\Sigma_{\text{lomo}}^{\text{calc}}$ და I_1^{exp} C_9H_{20} და $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ - თვის გამოთვლილია თეორიულად. (237) და (238), ფორმულების საფუძველზე (მოყვანილია ფრჩხილებში).

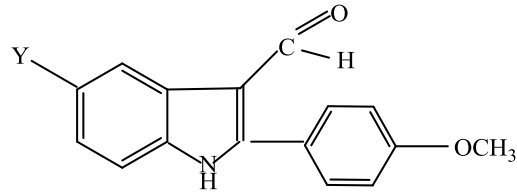
2.2. ზოგიერთი 3-ფორმิล-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ჩვენს მიერ მიღებულია ზოგიერთი 3-ფორმิล-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლი [186, 187] N, N-დიმეთილფორმამიდის და POCl_3 -ის გამოყენებით ოთახის ტემპერატურაზე და მიღებულია ალდეჰიდები (VII- XII) :



239

ზოგიერთი 3-ფორმิล-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლი მათემატიკურ-ქიმიურად გამოვიკვლიეთ [188] ქვაზი-რნბ-მატრიცის (რნბ) მეთოდით . ეს მატრიცა იგება შემდეგი ალგორითმის საფუძველზე: ქვაზი-რნბ-მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალ ქიმიურ ელემენტთა რიგობრივი ნომრების ჯამები, ხოლო არადიაგონალური ელემენტები - სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის ქიმიური ბმების ჯერადობები. ზოგადად , საკვლევი ნივთიერებები შეიძლება ასე ჩავწეროთ:



240

სადაც : Y ≡ CH₃ , Cl, Br .

X არის მოლეკულის მთავარი სტრუქტურული ფრაგმენტი.

შესაბამის ქვაზი-რნბ-მატრიცას აქვს სახე :

$$\begin{vmatrix} Z_y & 1 \\ 1 & Z_x \end{vmatrix}$$

241

ჩვენ შევისწავლეთ $\lg(\Delta(\overline{რნბ}))$ გამოყენების შესაძლებლობა ტოპოლოგიურ ინდექსად ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლებისთვის.

ცხრილი 42. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერინდოლებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები, ლღობის ტემპერატურები და მოლეკულური რეფრაქციები

ნაერთი	$\lg(\Delta(\overline{რნბ}))$	T _{ლღ.} °C	R _f
	3,07	122	0,38
	3,34	143	0,4
	3,6	(170)	(0,42)

ჩაწერილია ორი კორელაციის განტოლება:

$$T_{\text{ლღ.}} = 90 \lg(\Delta(\overline{რნბ})) - 154 \quad 242$$

$$R_{\text{მოლ.}} = 0,07 \lg(\Delta(\overline{რნბ})) + 0,17 \quad 243$$

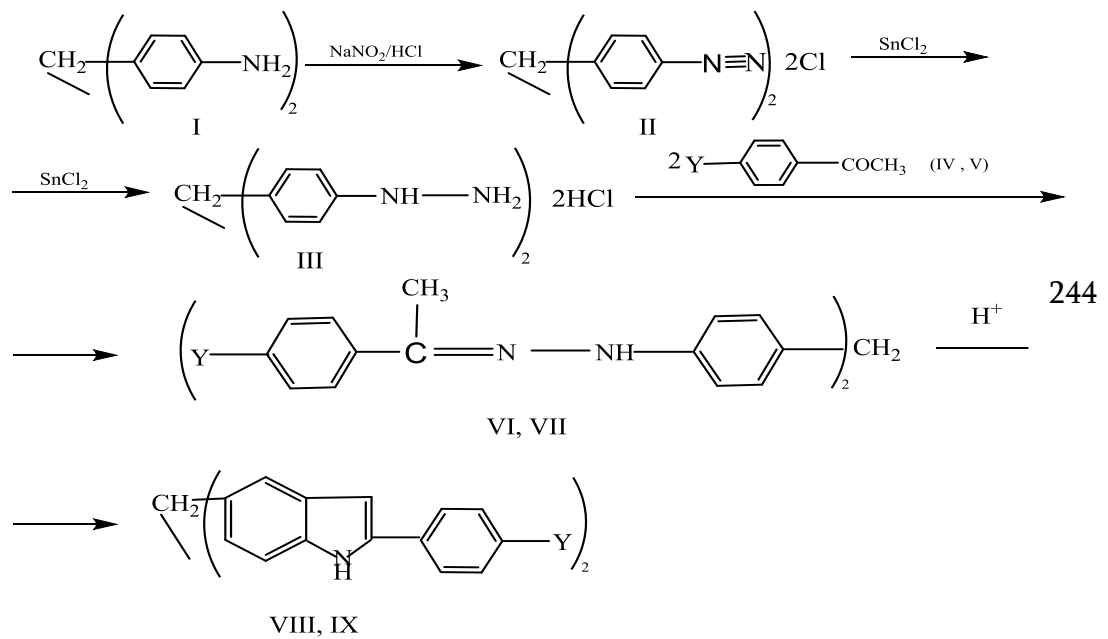
კორელაციის კოეფიციენტი r- შესაბამისად ტოლია 0.992, 0.991. ამრიგად ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით ადგილი აქვს ბრწყინვალე კორელაციას.

T_{ლღ.} და R_{მოლ.} 3-ფორმილ-5-ბრომ-2-ფენილმეთილეთერ ინდოლისთვის გამოთვლილია თეორიულად (242) და (243) ფორმულის საფუძველზე .

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

ჩვენს მიერ მიღებულია ზოგიერთი ბის (1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულები [189].

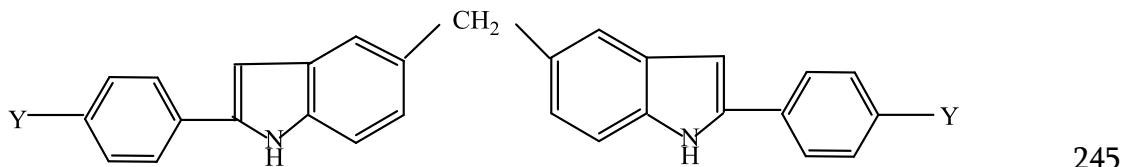
დიამინოდიფენილმეთანის დიაზოტირების პროდუქტის აღდგენით 4,4'-დიჰიდრაზინოდიფენილმეთანია მიღებული, რომლის ურთიერთქმედებით პ-ბრომ- და პ-ნიტროაცეტოფენონებთან და წარმოქმნილი დიჰიდრაზონების შემდგომი ბინდოლიზაციით მიღებულია 2,2'-დი(პ-ნიტროფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)- და 2,2'-დი(პ-ბრომფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანი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



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

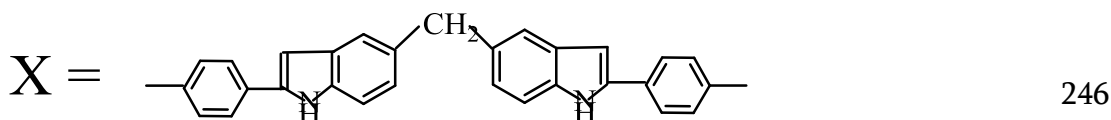
ჩვენს მიერ მიღებული ზოგიერთი ბის (1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულები მათემატიკურ-ქიმიურად გამოვიკვლიეთ ქვაზი-რნზ-მატრიცის (რნზ) მეთოდით [190], რომლის მიხედვითაც მიღებული შედეგი განხილული ფიზიკურ-ქიმიური თვისების მიმართ ემთხვევა ექსპერიმენტულად მიღებულ შედეგს.

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



სადაც $Y = \text{NO}_2, \text{Br}, \text{I}$.

X არის მოლეკულის მთავარი სტრუქტურული ფრაგმენტი:



მოლეკულას შეიძლება ზოგადად მივცეთ სახე:



შესაბამის ქვაზი-რნზ-მატრიცას აქვს სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_x & 1 & 1 \\ 1 & Z_y & 0 \\ 1 & 0 & Z_y \end{vmatrix} \quad 248$$

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

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

ჩაწერილია კორელაციის განტოლება:

$$T_{\text{ლ}} = 372 \lg(\Delta \widetilde{რნზ}) - 1703 \quad 249$$

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

ცხრილი 43. ზოგიერთი ბის(1H-ინდოლ-5-ილ)მეთანის წარმოებულებისთვის ტოპოლოგიური ინდექსები და ლლობის ტემპერატურები

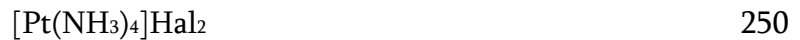
Y	$\lg(\Delta\overline{rnb})$	T _{ლ.}
NO ₂	5,04	172
Br	5,4	306
I	5,7	(418)

გამოთვლილია თეორიულად (249) ლლობის ტემპერატურა 2,2¹-დი(პ-იოდფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანისთვის ფორმულის საფუძველზე .

როგორც ზემოთ ავღნიშნეთ, ციკლიზაციის რეაქციები მიმდინარეობს სტრუქტურული სირთულის ზრდით, რომელიც რეაქციის წარმადობის შემფასებელია და გამოსავლიანობის უკუპროპორციულია, შესაბამისად 2,2¹-დი(პ-ნიტროფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანის და 2,2¹-დი(პ-ბრომფენილ)-ბის(1H-ინდოლ-5-ილ) მეთანის გამოსავლიანობა დაბალია და შესაბამისად 6% და 13% შეადგენს.

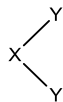
2.4. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

ამ ნაერთების ზოგადი ფორმულაა:



სადაც: Hal = F, Cl, Br, I .

ნ. კუპატაძის, ნ. ცეცაძის და პროფ. მ გვერდწითელის [191] მიერ შემუშავებულია მოდელი:



251

სადაც: X ≡ [Pt(NH₃)₄] , Y ≡ F, Cl, Br, I .

შესაბამის ფსევდო - რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

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

252

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

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$T_{\text{დაშლ.}} = -72,00 \lg(\overline{\Delta_{(რნბ)}}) + 536,16 \quad 253$$

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

ცხრილი 44. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენირების ტოპოლოგიური ინდექსები და დაშლის ტემპერატურები

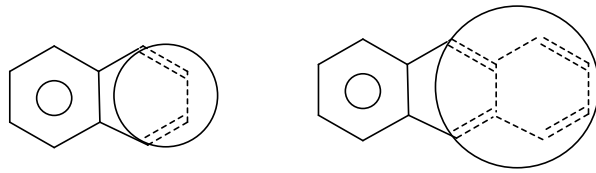
ნაერთები	$\lg(\overline{\Delta_{(რნბ)}})$	$T_{\text{დაშლ.}}, ^\circ\text{C}$
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{F}_2$	3,98	(249,6)
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$	4,53	210
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{Br}_2$	5,11	166
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{I}_2$	5,53	138

$T_{\text{დაშლ.}}$ $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{F}_2$ -სათვის გამოთვლილია თეორიულად, (253) ფორმულის საფუძველზე (იხ. ზემოთ).

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

აღნიშნული სისტემების მათემატიკურ-ქიმიურ გამოსაკვლევად [192] გამოყენებულია ტოპოლოგიური ინდექსი - ბლოკ-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი - $\lg(\Delta_B)$.

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

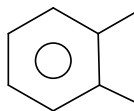


254

ორივე ნაერთის შემთხვევაში ვიყენებთ მარტივ მოდელს:

$$X = Y$$

255

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

$$\begin{vmatrix} Z_x & 2 \\ 2 & Z_y \end{vmatrix}$$

256

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

ცხრილი 45-ში მოყვანილია $\lg(\Delta_B)$, $-\chi \cdot 10^6$ (დიამაგნიტური ამთვისებლობა) და E/β (ბმების π - ელექტრონული ენერგია) ნაფტალინიდან ჰექსაცენის ჩათვლით.

ცხრილი 45. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადებისათვის ტოპოლოგიური ინდექსების, დიამაგნიტური ამთვისებლობის და ბმების π ელექტრონული ენერგიის მნიშვნელობები

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

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლებები:

$$-\chi_M = 250,0 \lg(\Delta_B) - 702,2 \quad 257$$

$$E/\beta_0 = 37,433 \lg(\Delta_B) - 105,388 \quad 258$$





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

$-\chi_M$ და E/β_0 ჰექსაცენისთვის გამოთვლილია თეორიულად, (257) და (258) ფორმულების საფუძველზე.

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

მათემატიკური - ქიმიური მეცნიერებების ფარგლებში, ბლოკ-მატრიცების (B - მატრიცების) მეთოდის საფუძველზე ჩატარდა პიროლის პირველი იონიზაციის პოტენციალისა და მისი ჰალკოგენის ანალოგების გამოკვლევა [193].

ცხრილი 46. ჰეტეროციკლური ნაერთებისთვის მოყვანილია ტოპოლოგიური ინდექსები და ნაერთთა იონიზაციის პირველი პოტენციალი

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

ამ ჰეტეროციკლური ნაერთების მარტივი მოდელი იყო განხილული:

$$X = Y \quad 259$$

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

$$\begin{vmatrix} Z_x & 2 \\ 2 & Z_y \end{vmatrix} \quad 260$$

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციის განტოლება :

$$I_1 = -1,71 \lg(\Delta_B) + 14,32 \quad 261$$

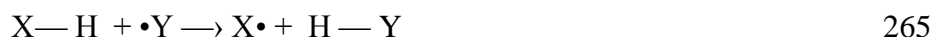
გამოთვლებმა აჩვენა, რომ r კორელაციის კოეფიციენტი ტოლია 0,982. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმის მიხედვით კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

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

ჩატარებულია მეთანის ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. პროფ. თ წიფწივამის, პროფ. მ გვერდწითელის და ნ. ცეცაძის [194] მიერ შესწავლილია ამ მრავალსტადიანი ჯაჭვური პროცესების უმნიშვნელოვანესი (სიჩქარის განმსაზღვრელი) სტადია:



ამ პროცესებისათვის შემუშავებულია მარტივი მოდელი:



სადაც: $\text{X} \equiv \text{CH}_3$, $\text{Y} \equiv \text{Cl, Br, I}$.

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

$$\begin{vmatrix} Z_x & 1 & 0 \\ 1 & Z_H & 0 \\ 0 & 0 & Z_y \end{vmatrix} \longrightarrow \begin{vmatrix} Z_x & 0 & 0 \\ 0 & Z_H & 0 \\ 0 & 1 & Z_y \end{vmatrix} \quad 266$$

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

შენონის ინფორმაციის ენტროპია ტოლია:

$$H = -\sum P_i \log_2 P_i \quad 267$$

სადაც : P_i - გარკვეული ცდომილების ალბათობაა.

შენონის მეთოდის მოდერნიზებული ვარიანტის ფარგლებში გამოვთვალოთ

$$H_r = H_f - H_i \quad 268$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ $(262) - (164)$ რეაქციებისათვის $H_r = 0,5376 > 0$. ამგვარად, პროცესი მიმდინარეობს სისტემის ინფორმატიულობის ზრდით.

კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

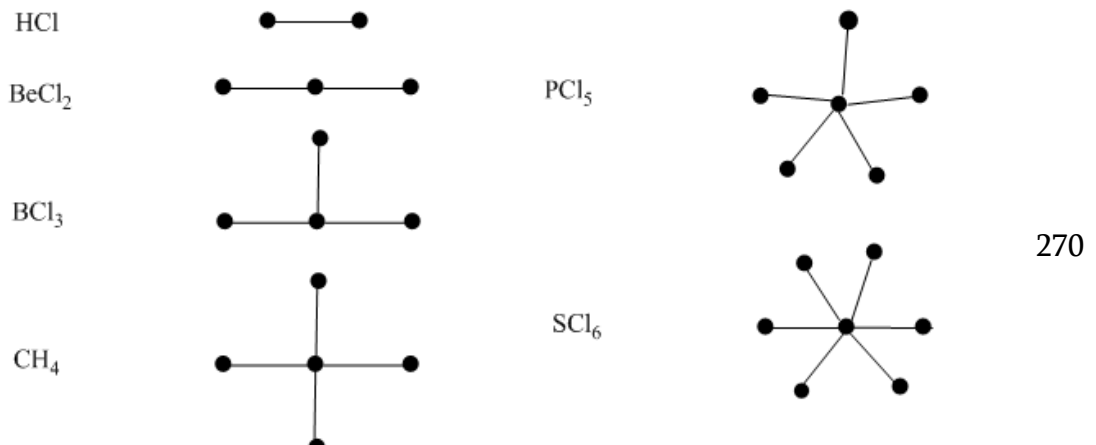
$$\lg k = 2,80 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) + 6,99 \quad 269$$

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

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

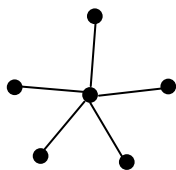
2.8. AB_n ტიპის მოლეკულები და გრაფი „ვარსკვლავის“ ერთი თვისება

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



ქვემოთ მოყვანილია „ხუთქიმიანი ვარსკვლავი“ და მისი შესაბამისი ფსევდოთანაზიარობის მატრიცა [195]. თანაზიარობის მატრიცის დიაგონალ-

ლური ელემენტებია წიბოების ჯერადობა (განხილულ შემთხვევაში - „1“ და „5“), არადიაგონალური - წვეროების ხარისხი.



271

$$\begin{vmatrix} 5 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

272

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

$$\Delta \begin{vmatrix} n & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{vmatrix} = 0$$

273

დასკვნა

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

დამტკიცებულია თეორემა: გრაფი „ვარსკვლავის“
ფსევდოთანაზიარობის მატრიცის დეტერმინანტი ნულის ტოლია.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. В. Штраубе. Пути развития химии. Т. 1,2 Москва, „Мир” , 1984.
2. И. Джуа. История химии. Москва, „Мир” , 1975.
3. А. Азимов. Краткая история химии. Москва, „Мир” , 1983.
4. Г. В. Быков. История органической химии. (Структурная теория, физическая органическая химия, расчетные методы). Москва, „ химия ”, 1976.
5. Л. Гаммет. Основы физической органической химии. Москва, „Мир”, 1972.
6. Chemical Application of Graph Theory / Ed. A. T. Balaban, London and etc., 1976.
7. P. H. Rouvray. Chemical Application of Topology and Graph Theory/Ed. A. T. Balaban. Amsterdam, Elsevier Science Publ, 1983.
8. К. Б. Яцимирский. Применение теории графов в химии. Киев, „Наука думка” 1975.
9. მ. გვერდწითელი. ორგანულ ნაერთთა ნომენკლატურის პრინციპები. თბილისი, თსუ გამომცემლობა, 1983.
10. З. Сланина. Теоретические аспекты явления изомерии в химии. Москва, „Мир”, 1983.
11. გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. იზომერიის მოვლენა მათემატიკური ქიმიის თვალთახედვით. თბილისი, „მეცნიერება“, 1992.
12. თ. ლობჯანიძე, მ. გვერდწითელი. იზომერია ორგანულ და კომპლექსურ ნაერთებში. თბილისი, გამომც. „უნივერსალი“, 2009.
13. გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. იზომერების კლასიფიკაცია ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში. საქ. სსრ. მეცნ. აკადემიის მოამბე, 1981, 104, №3, გ. 74.
14. М. И. Гвердцители, Г. А. Гамзиани. Понятие надсемейств в гомологическом ряду алканов. Изв. АН ГССР, сер. хим., 1983, 9, №1, г. 75.

15. მ. გვერდწითელი, გ. გამზიანი. ოჯახების განსაზღვრის მეთოდი ალკანების, ალკენების და ალკინების ჰომოლოგიურ რიგებში. საქ. სსრ მეცნ. აკად. მოამბე, 1983, 109, №2, გ. 309.
16. М. И. Гвердцители, М. Корнилов, Г. А. Гамзиани. Классификация и перечисление алканов. Тр. ТГУ, 1984, 248, с. 29.
17. М. И. Гвердцители, И. Д. Блиадзе, Р. О. Девдариани. Алгебраическая характеристика изомеров и реакций изомеризаций в гомологическом ряду алканолов. Сообщ. АН ГССР, 1986, 121, №2, с. 554.
18. М. И. Гвердцители, Р. О. Девдариани. Алгебраическая характеристика изомеров и реакций изомеризаций в гомологическом ряду алканов. Сообщ. АН ГССР, 1986, 121, №3, с. 525
19. М. И. Гвердцители, Г. А. Гамзиани. Классификация изомеров в семейства и надсемейства в гомологическом ряду алканолов. Журн. структ. химии, 1987, 28, №5, с. 151.
20. М. И. Гвердцители, Р. О. Девдариани. Алгебраическая характеристика валентных изомеров и процессов валентной изомеризаций бензола. Изв. АН ГССР, сер. хим. Сборник статей, Тбилиси, 1988, с. 309.
21. გვერდწითელი, ი. გვერდწითელი. ოჯახების ალგებრული დახასიათება ალკანთა ჰომოლოგიურ რიგში. საქ. სსრ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1983, 109, №2, გ. 61.
22. Г. А. Гамзиани, С. Л. Бокучава, Л. Л. Джибути, М. И. Гвердцители. Теоретическая оценка возможности существования предельных органических соединений. Изв. АН ГССР, сер. хим., 1990, 16, №4, с. 314.
23. Л. Л. Джибути, Г. А. Гамзиани, М. И. Гвердцители. Генерация семейств в гомодогических соединений. Изв. АН ГССР, сер. хим., 1991, 17, №1, с. 78
24. V. Gverdtsiteli, K. Kupatadze, G. Gamziani, M. Gverdtsiteli. Enumeration of Alkanes within the Scope of Mathematical Chemistry. Bull. Gerg. Nat. Acad. Sci. 2006. №2, p. 121.
25. გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. ორგანულ ნაერთთა ჩაწერის ალგებრული მეთოდი. უნივერსიტეტის შრომები, 1987. 256, გ. 41.

26. D. Akhobadze, M. Gverdtsiteli. Complex Molecules and their Algebraic Models by Modernized ANB-matrices. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 154, №2, p. 121.
27. M. I. Gverdtsiteli, N. G. Vepkhishvili. Algebraic-chemical Investigation of Complex Molecule within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Eng. News, 2000, №4, p. 146.
28. მ. გვერდწითელი. რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის გამოყენება მოლეკულებისა და მათი გარდაქმნების ალგებრულ-ქიმიური შესწავლისთვის. საქ. ქიმ. ჟურ., 2004, v. 4, №1, p. 147.
29. M. Gverdtsiteli, M. Gurgenidze. Algebraic-chemical Investigation of Thioethers within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Bull. Georg. Acad. Sci., 2005, v. 172, №1, p. 94.
30. М. И. Гвердцители, Г. Х. Арешидзе, И. М. Гвердцители. Теоретическая оценка октановых чисел в рамках метода ПНС-матриц. Georg. Eng. News, 2002, v. 2, p. 245.
31. M. I. Gverdtsiteli, G. N. Chachava. Decimal Logarithm of the Determinant of ANB-Matrix – as effective Topologic Index. Bull. of TICMI, 2001, v. 7, p. 30
32. K. Cherkezishvili, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Correlations „Structure-properties” for some Unsaturated Organosilicon Compounds within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2003, v. 3, №3, p. 243.
33. Т. Э. Лобжанидзе, К. Т. Купатадзе, М. И. Гвердцители. Исследование корреляций „структура-свойства“ в рамках метода ПНС- и ЭП-матриц. Изв. Науч. Акад. Наук. Грузии, сер. Хим, 2007, 33(4), с. 444.
34. Н. Н. Сидамонидзе, К. Т. Купатадзе, М. И. Гвердцители. Теоретическое исследование корреляций „структура-свойства“ в рамках методов ПНС-, квази-ПНС и ЭП-матриц. Прикладная физика . 2009, №6, с. 36.
35. მ. გვერდწითელი. რნბ-, ფსევდო-რნბ- და ქვაზი-რნბ-მატრიცის მეთოდის გამოყენება ალგებრულ ქიმიაში. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმიის სერია, 2009, 35(3), გ. 348.

36. M. I. Gverdtsiteli, M. S. Ruia, L. N. Lobdjanidze. Graphs „Stars” as Mathematical Models of some Molecules and their Transformations. *Georg. Eng. News*, №4, 2010, p. 76.
37. გვერდწითელი მ. ი., ჩიკვაძე ნ. ი. ტოპოლოგიური ინდექსები - მათემატიკური ქიმიის ეფექტური კონსტრუქციები. *Georg. Eng. News*, №2, 2017, p. 84.
38. მ. გვერდწითელი, გ. ჩაჩავა. CrBr₂ დუდილის ტემპერატურის თეორიული გამოთვლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. *საქ. ქიმ. ჟურ.* 2009, 9(2), გვ. 142.
39. ნ. კუპატაძე, მ. გვერდწითელი. P(III) ჰალოგენიდების მათემატიკური გამოკვლევა. *საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმიის სერია*, 2009, 35(4), გ. 504.
40. М. Ш. Русия, К. П. Гиоргадзе, М. Г. Гвердцители. Математика-химическое исследование галогенидов серебра в рамках метода ПНС-матриц. *Georg. Eng News.*, 2010, 55(3), с. 90.
41. G. N. Chachava, L. A. Laperashvili, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of the Correlations „Structure-properties” for Cycloalkanes. *Georg. Chem. Journ.* 2009, 9(2), p. 144.
42. N. Kobakhidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic Study of Cycloalkanes. *Bull. Georg. Acad. Sci.*, 1996, 153, №1, p. 69.
43. M. Gverdtsiteli, N. Kobakhidze. Algebraic Investigation of Cycloalkanes. *Bull. Georg. Acad. Sci.*, 1996, 154, №2, p. 114.
44. M. I. Gverdtsiteli, T. E. Lobzhanidze, M.G. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Liquid unbranched Alkanes within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. *Georg. Eng. News*, 2007, №1, p. 87.
45. Т. Лобжанидзе, М. Гвердцители. Алгебра-химическое исследование циклоалканов в рамках метода квази-ПНС-матриц. *Georg. Eng. News*, 2007, №2, с.
46. გ. ჩაჩავა. ჰალოგენწყალბადთა ალგებრული კვლევა რნბ-მატრიცების საშუალებით. ახალგაზრდა ქიმიკოსთა რესპუბლიკური კონფერენცია. თეზისები. თბილისი. 1997. გვ. 49.

47. გ. გურგენიძე, მ. გვერდწითელი. ჰალოგენწყალბადების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, 1997, 23, №1-4, გ. 94.
48. ნ. კუპატაძე, მ. გვერდწითელი. ჰალოგენწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 2010, 36(2), გ. 187.
49. ნ. ჩაჩავა, მ. გვერდწითელი, გ. გ. ჩაჩავა. V ჯგუფის მთავარი ქვე ჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდების ალგებრულ-ქიმიური შესწავლა. I რესპუბლიკური სამეცნიერო-მეთოდური კონფერენცია ქიმიაში მიძღვნილი პ. მელიქიშვილის დაბადების 150 წლისთავისადმი. თეზისები, თბილისი, 2000, გვ. 77.
50. M. I. Gverdtsiteli, G. G. Chachava, J. P. Metreveli, Investigation of Cobalt (I) Halogenides within the Scope of the ANB-matrices Method. Georg. Eng. New 1998. N3(7). P. 100-101 (5).
51. M. Gvedrtsiteli, G. G. Chachava, J. P. Metreveli. Investigation of Cobalt (II) Halogenids within the Scope of the ANB-Matrices Method. Georg. Eng. News., 1998, №3 (7), p. 174.
52. ნ. კობახიძე, მ. გვერდწითელი, გ. ჩაჩავა. ტუტე ლითონი ჰალოგენიდების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე. ქიმ. სერია. 1996, ტ. 22, №1-4, გვ. 187-189 (2).
53. ნ. კობახიძე, გ. ჩაჩავა, მ. გვერდწითელი. ტუტე ლითონების ჰალოგენიდების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 1996, 22, №1-4, გ. 88.
54. მ. გვერდწითელი, ლ. უგულავა, გ. გურგენიძე. ტუტე ლითონების ზოგიერთი ნაერთის ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 1996, 22, №1-4, გ. 108.
55. М. И. Гвердцители, А. Д. Чубинидзе. Алгебра-химическое изучение псевдогидроформатов щелочных металлов в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2006, 6(1), с. 60.

56. М. И. Гвердцители, Г.Н.Чачава,И.А.Лаперашвили. Теоретическое исследование галогенидов щелочных металов в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2007, 7(4), с. 413.
57. М. Ш. Русия, К. П. Гиоргадзе, М. И. Гвердцители. Математика-химическое исследование галогенидов щелочных металов в рамках метода ПНС-матриц. Georg. Eng. News, 2011, 57(1), с. 115.
58. G. N. Chachava, I. M. Gverdtsiteli, G. N. Chachava, M. I. Gverdtsiteli. Mathematical-chemical Investigation of Sodium Halides. Georg. Eng. News, 2010, №4, p. 81.
59. გ. ჩაჩავა, მ. გვერდწითელი, ი. ლაფერაშვილი, მ. გვერდწითელი. დარიშხან (III) ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა რნბ-მატრიცის მეთოდის გამოყენებით. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ, 2010, 36(3), გ. 330.
60. Chachava G., Gverdtsiteli M. Algebraic Characterization of Arsenic (III) Halogenides. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, v. 153, №2, p. 230-231.
61. G. Chachava, M. Gverdtsiteli. Algebraic Characterization of Arsenic (III) Halogenides. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 153, №3, p. 210.
62. M. Gverdtsiteli, G. Chachava. Algebraic-chemical Investigation of Arsenic (III) Halogenids within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Proceedings of TSU, 2005, 360, p. 17.
63. I. Laperashvili, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Correlation “Structure-properties“ for some symmetrical secondary Arsines. Georg.Chem. Journ. 2006, 6(2) , p.186.
64. M. I. Gverdtsiteli, T. Z. Alavidze. Algebraic-chemical Investigation of some Dichloranhydrides of Di-(p-carboxyphenylaryc) (alkyl) arsinoxide within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg. Eng.News, 2007, №1, p. 85.
65. G. Chachava, M. Gverdtsiteli, L. Laperashvili. Algebraic-Chemical Investigation of the Reaction of Methyl- α -(Naphthyl)Alkylarsine Iodides Synthesis. Georg. Eng. News, 2001, v.1, №1, p. 68.

66. გ. ჩაჩავა, მ. რუსია, ლ. ლობჯანიძე, მ. გვერდწითელი. დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე. ქიმიის სერია, 2012 ტ. 38, №2-3, გვ. 271.
67. G. Chachava, M. Gverdtsiteli. Algebraic Characterization of Arsenic (III) Halogenides. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 153, №3, p. 210.
68. M. Gverdtsiteli, G. Chachava. Algebraic-chemical Investigation of Arsenic (III) Halogenids within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Proceedings of TSU, 2005, 360, p. 17.
69. I. Laperashvili, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Correlation “Structure-properties“ for some symmetrical secondary Arsines. Georg.Chem. Journ. 2006, 6(2) , p.186.
70. M. I. Gverdtsiteli, T. Z. Alavidze. Algebraic-chemical Investigation of some Dichloranhydrides of Di-(p-carboxyphenylarylc) (alkyl) arsinoxide within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg. Eng. News, 2007, №1, p. 85.
71. სიღამონიძე ნ. ნ., ქოიავა ნ. ა., გვერდწითელი მ. ი. IV ჯგუფის B ქვეჯგუფის ელემენტების დიოქსიდების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა. Georg. Eng. News, №2, 2017, p. 160.
72. ლ. უგულავა, გ. გურგენიძე, მ. გვერდწითელი, მ. აბაშმაძე. ოქსიდების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1996, 152, №3, გ. 214.
73. ბრეგაძე მ. ა., ლობჯანიძე ლ. ვ., გვერდწითელი მ. ი. ჰალოგენწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. Georg. Eng. News, №2, 2017, p. 158.
74. Karchkhadze M.G., Gverdtsiteli M.I., Mathematical-chemical Investigation of Methacrylic Acid. Georg. Eng. News, 2011, №2, p. 115.
75. ქარჩხაძე მ. გ., გვერდწითელი მ. ი. ერთფუძიანი, ნაჯერი, განუმტობელი კარბონწყავების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. Georg. Eng. News, №2, 2017, p. 162.
76. M. G. Gverdtsiteli, G. Otinashvili, M. Bedinashvili, M. Gverdtsiteli, N. Ovsianikova. Algebraic-chemical Investigation of Monocarbon Acids within

- the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. *Georg. Chem. Journ.*, 2003, v. 3, №3, p. 244.
77. M. I. Gverdtsiteli, O. V. Manjgaladze, N. M. Telia. Algebraic-chemical Investigation of Correlations „Structure-properties” for Halogensubstituted Acetic Acids. *Georg. Chem. Journ.* 2005, 5(3), p. 271.
 78. M. Gverdtsiteli, N. Ovsyanikova, M. Jelia. Algebraic-chemical Investigation of Correlation “Structure-properties” for some Carboxylic Acids. *Georg. Chem. Journ.* 2006, 6(2), p. 187.
 79. N. Ovsianikova, N. Kupatadze, E. Markarashvili, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Correlations „Structure-properties” for Dicarboxylic Acids. *Georg. Chem. Journ.* 2008, 8(1), p. 53.
 80. N. Kupatadze, M. Bedinashvili, M. Gverdtsiteli. Mathematical-chemical Study of Propionic Acid Esters. *Proc. Georg. Nat. Acad. Sci, chem. ser.*, 2009, 35 (2), p. 226.
 81. Г. Г. Отинашвили, Г. Н. Чачава, М. Г. Гвердцители. Алгебра-химическое исследование некоторых алкилзамещенных муравьиных кислот. *Georg. Chem. Journ.* 2010(2), p. 166.
 82. P. A. Gaokidze, L. S. Topuria, K. T. Kupatadze, M. I. Gverdtsiteli. Математика-химическое исследование неразветленных карбоновых кислот. *Georg. Eng. News*, 2010, №4, p. 85.
 83. გ. ჩაჩავა, ნ. ოვსიანიკოვა, მ. გვერდციტიელი. სილიციუმის ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. *საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმიის სერია*, 2009, 35 (4), გ. 503.
 84. L. Khanashvili, N. Kupatadze, N. Kobakhidze, M. Gverdtsiteli, E. Markarashvili. Theoretical Study of Thienyl-Containing Organosilanes within the Scope of the ANB-Matrices Method. *Bull. Georg. Acad. Sci.*, 2000, 161, №3, p. 452.
 85. К. П. Гиоргадзе, М. Ш. Русия, М. Г. Гвердцители. Математика-химическое исследование дитретичных ацетиленовых α -гликолей фероценного ряда. *Georg. Eng. News.*, 2010, 54 (2), с. 97.

86. Чачава Г. Н. Гигаури Р. Д., Угулава М. М., Гургенидзе И. И. синтез иодистых метилди-п-толилалкил(арил)арсониев. Сообщ. АН ГССР, 1982, т. 105, №1, с. 73-76.
87. Chachava G. N, Gverdtsiteli M. I., Theoretical Study of Methyl-dip-tolyl-alkylarsonium Iodides within the Scope of Quasi-ANB-matrices Method. Georgian Chem. Journ., 2002, v. 2., №3, p. 243-244.
88. 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.
89. G. Chachava, M. Gverdtsiteli. Theoretical Study of Methyl-di-1-tolylalkylarsenicum Iodates within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2002, v. 2, p. 243.
90. Гигаури Р. Д., Чачава Г. Н., Чернокальский Б. Д., Угулава М. М., синтез перхлоратов дифенилметилалкиларсониев. ЖОХ, 1973, т. 43, вып. 4, с. 835-836.
91. Chachava G., Gverdtsiteli M. Theoretical investigation of Diphenylmethylalkylarsonium Perchlorates within the Scope of the ANB-matrices method. Georgian Chem. Journ., 2002, v. 2., №2, p. 175-176.
92. მ. რუსია, ლ. ლობჯანიძე, მ. გვერდწითელი. ნიტროალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე. ქიმიის სერია, 2010 ტ. 36, №3, გვ. 334 .
93. ჩიკვაძე ი. შ, ხიტორი გ. შ., სამსონია შ.ა., გვერდწითელი მ.ი. 2-პ-ნიტროფენილინდოლის ზოგიერთი ნაწარმის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა Georg. Eng. News, 2017, №3, გვ. 87.
94. D. M. Tabidze, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of some Indolyl-containing Heterocyclic Compounds. Georg. Chem. Journ. 2003, v. 3, №4, p. 354.

95. M. V. Trapaidze, M. I. Gverdtsiteli. Теоретическое исследование некоторых полимерных бензопирролоиндольных соединений в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2008, 8(1), с. 54.
96. ქარჩხაძე მ. გ., ფირცხელიანი ნ. ა., გვერდწითელი მ. ი. განუმტოებელი ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა ქვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, 2016, №1, გვ. 97
97. N. A. Kuprashvili, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Organochlorogegermanium Hydrides within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2009, 9(6), p. 543.
98. K. T. Kupaadze, M. I. Gverdtsiteli. Алгебра-химическое исследование корреляций „структура-свойства“ для германоциклобутанов. Хим. ж. Груз., 2009, 9(6), с. 542.
99. G. N. Chachava, M. G. Gverdtsiteli, M. I. Gverdtsiteli, I. A. Laprashvili. Теоретическое исследование тетраалкилгерманов в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 9(2), 2009, с. 143.
100. N. A. Kuprashvili, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Organochlorogegermanium Hydrides within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2009, 9(6), p. 543.
101. B. D. Djioshvili, M. B. Bedinashvili, L. G. Turiasvili, M. I. Gverdtsiteli. Теоретическое исследование органогерманий галогенидов в рамках метода псевдо-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2010, 10(1), с. 94.
102. K. P. Giorgadze, M. Sh. Rusia, M. B. Bedinashvili, M. G. Gverdtsiteli. Математика-химическое исследование дигалоидов германийциклогексанов в рамках метода псевдо-ПНС-матриц. Georg. Eng. News., 2010, 54(2), с. 99.
103. გ. ჩაჩავა, მ. ბედინაშვილი, მ. გვერდწითელი, ლ. ლობჯანიძე. დიჰალოგენგერმანო-ციკლოპენტანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. ქიმ. ჟურ., 2011, 11(1), გვ. 72.

104. L. Asatiani, M. Gverdtsiteli. Algebraic Chemical Studi of some Ferrocene - and Germanium- containing Acetylenic Compounds and the Reaction of their Synthesis. Bull. Georg. Acad. Sci., 1999, 159, №1, p. 48.
105. გ. ჩაჩავა, მ. ნადირაშვილი, მ. გვერდწითელი. ზოგიერთი ორგანოჰალოგენგერმა-ნიუმჰიდრიდის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ, 2010, 36(2), გ. 188.
106. გახოკიძე რ. ა., ტაბატაძე ლ. ე., გახოკიძე მ. რ., გვერდწითელი მ. ი. ჰალოგენმეთანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, 2013, №4, გვ. 121
107. მ. გვერდწითელი, გ. გამზიანი, ი. გვერდწითელი. მონოჰალოგენმეთანების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 1993, 19, №3-4, გ. 324.
108. გ. ჩახტაური, მ. გვერდწითელი. მონოჰალოგენმეთანების ალგებრული განხილვა მრბს-მატრიცების გამოყენებით. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 1994/95, 20/21, №1-4, გ. 75.
109. N. Kobakhidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic Investigation of Monohalogenmethanes in Terms of MBL-Matrices Method. Bull. Georg. Acad. Sci., 1998, 158, №1, p. 76.
110. Чачава Г.Н., Бединашвили М.В., Лобжанидзе Б.Г., Гвердцители М.И.. Математика-химическое исследование галогенидов Hg(I) в рамках метода псевдо-пнс-матриц . Georg. Eng. News., 2011, 58(2), с. 113.
111. ქ. კუპატაძე, მ. გვერდწითელი. $[Co(NH_3)_5Hal]^{2+} + V^2$ რედოქს რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე. ქიმიის სერია, 2014 ტ. 40, №2-3, გვ. 334 .
112. R. I. Machkhoshvili, G. G. Chachava, M. I. Gverdtsiteli, G. N. Chachava. Investigation of the Redox Reactions between $[Co(NH_3)_5Hal]^{2+}$ and Hydrogen Atom within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices method. Georg. Eng. News, 1998, №4, p. 234.

113. R. I. Machkhoshvili, G. G. Chachava, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic and Chemical Investigation of the Redox Reactions between $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Hal}]^{2+}$ and Cr^{2+} . Georg. Eng. News., 1998, №4, p. 236.
114. G. Chakhtauri, M. Gverdtsiteli, N. Tsetsadze, R. Gelashvili. Graph “Assymmetric Star” and its Application for Algebraic-Chemical Study of Reactions of Coordination Compounds. Bull. Georg. Acad. Sci., 1999, 160, №2. p. 277.
115. გვერდწითელი მ. ი., სიღამონიძე ნ. ნ., ჭაჭუა ე. ი., ქოიავა ნ. ა. AB_4 ტიპის მოლეკულები და ჯანბ-მატრიცა . Georg. Eng. News, №1, 2018, p. 79.
116. გვერდწითელი მ. ი., ლობჯანიძე თ. ე., თორთლაძე ქ. თ. AB_4 ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, №2, 2018, p. 80.
117. გვერდწითელი მ. ი., ქარჩხაძე მ. გ., გვერდწითელი ი. მ. სილიციუმის ტეტრაჰალოგენწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, №1, 2018, p. 83.
118. გიორგაძე ქ. პ., გვერდწითელი მ. ი. ურანის ქლორიდების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა. Georg. Eng. News, №1, 2018, p. 81.
119. გვერდწითელი მ. ი., ოვსიანიკოვა ნ. ნ., ლობჯანიძე თ. ე., გიორგაძე ქ. პ. AB_n ტიპის მოლეკულების მათემატიკურ-ქიმიური მოდელი და ჯანბ-მატრიცა. Georg. Eng. News, №2, 2018, p. 82.
120. ქარჩხაძე მ. გ., ოვსიანიკოვა ნ. ნ., გვერდწითელი მ. ი. AB_3 ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, №1, 2018, p. 81.
121. გვერდწითელი მ. ი., ლობჯანიძე ლ. ვ. AC_n ტიპის მოლეკულების გამოკვლევა ჯანბ-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, №1, 2018, p. 88.
122. М. И. Гвердцители, И. М. Гвердцители. Алгебра-химическое исследования корреляции „структура-свойства” для некоторых простых и сложных эфиров в рамках метода квази- ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2005, 5(2), с. 174.

123. М. И. Гвердцители, Е. Н. Рядченко. Алгебра-химическое исследование эфиров бензойной кислоты в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2007, 7(2), с.117.
124. K. Kupatadze, M. Gverdtsiteli, N.Kuprashvili. Algebraic-chemical Investigation of Esters within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg.Chem. Journ. 2007, 7(3), p. 318.
125. Т. Э. Лобжанидзе, М. С. Квернадзе, Э. Г. Маркарашвили, М. И. Гвердцители. Теоретическое исследование сложных эфиров в рамках метода квази-ПНС-матриц. Изв. Акад. Наук. Грузии, сер. Хим, 2007, 33(4), с. 449.
126. M. Gverdtsiteli, N. Chikvaidze. Algebraic-chemical Investigation of saturated Aldehyds within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2005, 5(6), p. 601.
127. В. И. Гвердцители, К. Т. Купатадзе, М. И. Гвердцители. Алгебра-химическое изучение реакции образования формальдегида и цианистого водорода. Хим. ж. Груз., 2007, 7(1), с. 66.
128. М. Г. Гвердцители, М. Б. Бединашвили, М. И. Гвердцители. Теоретическое исследование аминокислот в рамках метода квази-ПНС-матриц. Хим. ж. Груз., 2008, 8(2), с. 168.
129. M. H. Yavuz, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Primery Amin within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Chem. Journ., 2003, v. 3, №4, p. 353.
130. მ. გვერდწითელი, გ. გამზიანი, ი. გვერდწითელი. ოქსონარების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1994, 150, №1, გ. 80.
131. მ. გვერდწითელი, გ. არეშიძე, ი. გვერდწითელი. ტრუქტურულ კანონზომიერებათა ანალიზი იზომერულ ოქტანთა აგებულებასა და მათ ოქტანურ რიცხვებს შორის. საქ. ქიმ. ჟურ., 2001, №1, გვ. 60.
132. გ. ჩახტაური, გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. თიოლების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1995, 151, №3, გ. 106.

133. N. Kobakhidze, Z. Machaidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic Investigation of Thioethers. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 154, №1, p. 71.
134. M. Gverdtsiteli, D. Tabidze, M. Gurgenidze. Algebraic-chemical Study of the Thiols within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Georg. Chem. Journ. 2006, 6(1), p. 61.
135. მ. გვერდწითელი, გ. გამზიანი, ი. გვერდწითელი. ჰალოგენალკანების ალგებრული გამოკვლევა. საქ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1991, 141, №3, გ. 553.
136. T. Lobzhanidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of Correlation "Structure-properties" for Alkyl Halides within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Bull. Gerg. Nat. Acad. Sci. 2000, v. 175 №2, p. 93.
137. T. E. Lobzhanidze, M. S. Kvernadze, M. I. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of methyl Halides within the Scope of the Quasi-ANB-Matrices Method. Georg. Eng. News, 2008, №1, p. 168.
138. N. Kobakhidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic Characterization of the Reactions of Halogenation of Alkans. Bull. Georg. Acad. Sci., 1998, 158, №1, p. 56.
139. М. И. Гвердцители, Р. О. Девдариани. Алгебраический метод записи органических соединений и реакций. Изв. АН ГССР, сер. хим., 1986, 12, №3, с. 231.
140. თ. მაჭავარიანი, გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. მოლეკულათა რეაქციის უნარიანობის ალგებრული დახასიათება. საქ. სსრ მეცნ. აკად. მოამბე, 1989, 136, №3, გ. 581142.
141. Зефиров Н. С., Трач С. С., Гамзиани Г. А. Описание органических реакций в рамках формально-логического подхода . – Тбилиси: Мецნიერება, 1993.
142. Гамзиани Г. А. Алгебраическая классификация органических соединений. – Изв. АН Грузии, 1993, т. 19, №1, с. 70.
143. Гамзиани Г. А. Локальные индексы структурной сложности протекания органических реакций -В кн.: Международная конференция по химии. - Тез. докл., Тбилиси, 1994, с. 67.

144. Гамзиани Г. А. Формальная модель структурной сложности органических молекул. -В кн.: Международная конференция по химии. - Тез. докл., Тбилиси, 1994, с. 72.
145. Г. А. Чахтаური, М. И. Гвердцители. Алгебраическое рассмотрение реакции хлорирования изопентана. Изв. АН Грузии сер. хим., 1996, 22, №1-4, с. 124.
146. М. И. Гвердцители, М. Н. Гургенидзе. Алгебра-химическое исследования реакции циклизации гексена. Georg. Eng. News, 2005, №2, с. 195.
147. მ. გვერდწითელი, რ. დევდარიანი. აცეტილენის დიმერიზაციის და ციკლოდიმერიზაციის პროცესის ალგებრული დახასიათება. თსუ შრომები, 287, 1989, გ. 39149.
148. ქარჩხაძე მ. გ., ფირცხელიანი ნ. ა., გვერდწითელი მ. ი. განუმტოებელი ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა კვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. Georg. Eng. News, 2016, №2, გვ. 102
149. М. И. Гвердцители, М. Н. Гургенидзе. Алгебра-химическое исследования реакции циклизации гексена. Georg. Eng. News, 2005, №2, с. 195.
150. М. И. Гвердцители, Р. О. Девдариани. Формально-алгебраическая характеристика электроциклических реакций . Сообщ. АН ГССР, 1988, 129, №2, с. 321.
151. M. Gverdtsiteli, R. Chikvinidze, I. Gverdtsiteli. Algebraic Investigation of Radical Elimination Reactions. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 153, №3, p. 307
152. მ. რუსია, მ. ბედინაშვილი, მ. გვერდწითელი. რადიკალური ელიმინაციის რეაქციათა შესწავლა ფსევდო-რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 2010, 36(4), გვ. 442.
153. V. Gverdsteli, G. Chachava, M. Gvertsiteli. Investigation of Radical Elimination Reactions within the Scope of Quazi-ANB-matrices Method. Bull. Georg. Nat. Acad. Sci., 2006, v. 174, №3, p. 434.
154. N. Samsonia, M. Gvertsiteli. Algebraic-Chemical Characterization Investigation of Fisher's Reaction within the Scope of Quasi-ANB-Matrices Method. Bull. Georg. Acad. Sci., 2001, 164, №1, p. 68.

155. M. Gverdtsiteli, N. Samsonia. Algebraic Investigation of Fisher's Reaction. Bull. Georg. Acad. Sci., 1996, 154, №1, p. 47.
156. Chachava G., Gverdtsiteli M., Laperashvili I. Algebraic Chemical Investigation of the Reaction Methyl-di-(α -Naphthyl) Alhylarsine Iodides Synthesis. Georg. Eng. News, 2001, v. 1, №1, p. 68.
157. თ. წივწივაძე, ნ. ოვსიანიკოვა, მ. გვერდწითელი. კეტონებისა და რთული ეთერების კონდენსაციის რეაქციის ალგებრულ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. ქიმ. ჟურ. 2006, 6(5), გვ. 543.
158. ნ. სიღამონიძე, რ. ჩიქვინიძე, მ. გვერდწითელი. 1-S-ცისტეინაცეტოგლუკოზის სინთეზის რეაქციის ალგებრულ-ქიმიური შესწავლა ქვაზი-რნზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. საქ. ქიმ. ჟურნ., 2002, ტ. 2, №2 გვ. 171.
159. М. И. Гвердцители, И. Д. Блиадзе, Р.О. Девдариани. Алгебраическая характеристика изомеров и реакций изомеризаций в гомологическом ряду алканолов. Сообщ. АН ГССР, 1986, 121, №2, с. 541.
160. М. И. Гвердцители, Р. О. Девдариани. Алгебраическая характеристика изомеров и реакций изомеризаций в гомологическом ряду алканов. Сообщ. АН ГССР, 1986, 121, №3, с. 325.
161. M. I. Gverdtsiteli, N. Kobakhidze, M. G. Gvertsiteli. Algebraic Characterization of Thermal Izomerization of Boracyclanes. Bull.Georg.Acad.Sci., 1997, 155, №2, p. 104.
162. М. И. Гвердцители. Алгебраический анализ нитрозо-изонитрозо таутомерии. Тр. ТГУ, 287, 1989, с. 33.
163. მ. გვერდწითელი, ა. გახოკიძე. კეტო-ენოლური ტაუტომერიის ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, 1997, 23, №1-4, p. 70.
164. მ. გვერდწითელი, მ. ჯელია, ი. გვერდწითელი. სემიდური გადაჯგუფების ალგებრულ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. ქიმ. ჟურ., 2005, 5(2), გვ. 173.
165. М. Гвердцители. Алгебра-химическое исследование перегруппировки Гахокидзе. Труды ТГУ, 2005, 360, с. 7.

166. მ. გვერდწითელი, გ. გამზიანი, ი. გვერდწითელი. ბეკმანის გადაჯგუფების ალგებრული დახასიათება. საქ. მეცნ. აკად. მოამბე, 1990, 140, №2., გ. 325.
167. М. И. Гвердцители, Г. А. Гамзиани, И. М. Гвердцители. Алгебарическая характеристика перегруппировки Арбузова. Сообщ. АН Грузии, 1991, 144, №2.
168. I. Gverdtsiteli, M. Gverdtsiteli, I. Gverdtsiteli (Jun). Investigation of Favorski Reaction within the Scope of Algebraic Chemistry. Georg. Eng. News, 2001, v.1, №1, p. 56.
169. Tsaguria E. N, Gverdtsiteli M. I. and Gakhokidze A. R. Theoretical Investigation of Kreb's Cycle within the Scope of Algebraic Chemistry. Georg. Eng. News, 2002, №4, p. 181.
170. Tsaguria E. N., Gakhokidze A. R. and Gvertsiteli M. I. Theoretical Investigation of Krebs' Cycle within the Scope of Quantum Chemistry and Algebraic Chemistry. Journ. of Biolog. Physics and Chemistry (JBPC), 12/2003, v. 3, №3/4, p. 93-95.
171. Цагурия Е. Н., Гахокидзе А. Р., Гвердцители М. И. Теоретическое исследование цикла Кребса. Баку, Азербайджанский химический журнал, 2003, №4, с. 47.
172. М. Гвердцители, М. Гургенидзе. Исследование перегруппировки Зелинского в рамках метода квази-ПНС-матриц и энтропии информации Шеннона. Труды ТГУ, 2005, 360, с. 14.
173. გ. გამზიანი. მათემატიკური ქიმიის რჩეული თავები. – თბილისი: მეცნიერება, 1990. გვ. 96
174. Зефиоров Н. С., Трач С. С., Гамзиани Г. А. Описание органических реакций в рамках формально-логического подхода. – Тбилиси: Мецნიერება, 1993.
175. Гамзиани Г. А. Алгебраическая классификация органических соединений. – Изв. АН Грузии, 1993, т. 19, №1, с. 70.

176. Гамзиани Г. А. Локальные индексы структурной сложности протекания органических реакций .-В кн.: Международная конференция по химии. -Тез. докл., Тбилиси, 1994, с. 67.
177. Гамзиани Г. А. Формальная модель структурной сложности органических молекул. -В кн.: Международная конференция по химии. -Тез. докл., Тбилиси, 1994, с. 72.
178. Гамзиани Г. А. Сложность органических молекул и реакций. 1. Локальные индексы реакционных центров и характеристики сложности органических реакций.- ЖОрХ, 1995, т. 31, вып. 1, с. 31.
179. Гамзиани Г. А. Сложность органических молекул и реакций. 2. Формальная модель структурной сложности органических молекул.- ЖОрХ, 1995, т. 31, вып. 1, с. 35.
180. გ. ლეკიშვილი, დ. ასათიანი. მოლეკულური დესკრიპტორები ელემენტორგანულ ნაერთთა ქიმიაში. თბილისი, თსუ გამომც., 1998.
181. გ. ლეკიშვილი. ალკენების ცის-ტრანს იზომერული გარდაქმნების ალგებრული გამოკვლევა. საქ. მეცნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 1994, ტ. 20-21, №1-4, გვ. 152.
182. G. Lekishvili. A Parametric Model for Constraction of the Topological Indices of Information Type. Bull. Acad. Sci. Georg, 1997, v.155, №1. p. 77.
183. G. Lekishvili. On the Characterization of molecular stereostructure. 1. Cis-trans Isomeism. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1997, v. 37, №5, p. 924.
184. G. Lekishvili, M. Gverdtsiteli, N. Tsetsadze. Mathematical-chemical Investigation of some straight – chained Alkanes. Bull. Georg. Nat. Acad. Sci., 2011, 5(3), p. 74.
185. ნ. ცეცაძე, ნ. ნარიმანიძე, ი. ჩიკვაძე. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-არილინდოლის სინთეზი და კონდენსაციის რეაქციები. მეოთხე რესპუბლიკური სამეცნიერო მეთოდური კონფერენცია ქიმიაში. თბილისი, 29-31 ოქტომბერი, 2002წ. გვ.33.
186. ნ. კობახიძე, ნ. სამსონია, ნ. თარგამაძე, ნ. ცეცაძე, ნ. ლომაძე. 2-ფენილინდოლის ახალი წარმოებულების სინთეზი. მესამე

რესპუბლიკური სამეცნიერო-მეთოდური კონფერენცია ქიმიაში.
თბილისი, 9-12 ოქტომბერი, 2000წ. გვ. 29.

187. წივწივაძე თ. ი., ცეცაძე ნ. რ. ზოგიერთი 3-ფორმილ-2-ფენილმეთილეთერ-ინდოლის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა
Georg. Eng. News, 2020, 85(2), გვ. 121-122.
188. Sh. Samsonia, I. Chikvaidze, N. Narimanidze, N. Tsetsadze. Synthesis of the new Derivatives of Bis(1H-Indolo-5-yl)Methane. Proceedings of the Georgian National Academy of sciences, 2003, v. 29, №3-4, p. 222-224.
189. N. Tsetsadze Mathematical-Chemical Investigation of some Derivatives of Bis (1H-indolo-5-yl)Methane . Bull. Georg. Natl. Acad. Sci., vol. 15, no. 1, 2021. P. 20-22.
190. ნ. კუპატაძე, ნ. ცეცაძე, მ. გვერდწითელი. ტეტრაამინოპლატინა (II) დიჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. საქ. მეცნ. ეროვნ. აკად. მაცნე, ქიმ. სერ., 2011, 37 (1-2), გვ. 91-92.
191. თ. წივწივაძე, ნ. ცეცაძე, მ. გვერდწითელი. წრფივად კონდენსირებული ბენზოლის ბირთვების შემცველი ნახშირწყალბადების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. Georg. Eng. News, 2011, 58(2), გვ. 119-120.
192. N. R. Tsetsadze, M. I. Gverdtsiteli. „MATHEMATICAL – CHEMICAL INVESTIGATION OF THE IONIZATION POTENTIALS OF PYRROL AND ITS CHALCOGEN – ANALOGOUS “ 2-nd International conference on Organic Chemistry. 2011, Tbilisi, Georgia, September 25-27. 212 p.
193. თ. წივწივაძე, ნ. ცეცაძე, მ. გვერდწითელი. მეთანის რადიკალური ჰალოგენირების რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. Georg. Eng. News, 2011, (2), გვ. 121-122.
194. G. Chakhtauri, M. Gverdtsiteli, N. Tsetsadze. “AB_n Type of molecules and One Property of Graph “Star”. Bull. Georg. Acad. Sci., 1997, 155 (1), p. 74.