

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია

CHEMICAL SERIES

СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

2014 № 2 – 3

ტომი

Volume 40

Том

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

შინაარსი

ანალიზური ქიმია

თ.როყვა, თ.ჩაზუნაშვილი, დ.ძანაშვილი, ნ.ბუთლიაშვილი, თ.მაჩალაძე. მანგანუმის 117
კარბონატული მადნის ფაზური და ქიმიური შედგენილობის კვლევა

პ.იავინი, ნ.აბულაძე, მ.ჯავახია, ლ.ჭურაძე, ე.ხურციძე. იოდის განსაზღვრა რბილი წამლის 126
ფორმებში*

ელექტროქიმია

ი.გურგენიძე, შ.ჯაფარიძე. მელითის მჟავას აღსორბცია ვერცხლისწყალზე ეთანოლის 127
ხსნარებიდან

ც.გვინიძე, ფ.ქებაძე, ჯ.ანელი, ლ.აკაურია, ქ.უგრელიძე. მელითის მჟავას აღსორბცია 133
ვერცხლისწყალზე ეთანოლის ხსნარებიდან*

ორბანული ქიმია

რ.კუბლაშვილი, ვ.უგრეხელიძე, ნ.ქარქაშაძე, ქ.ებრაღიძე. ამინობენზოის მჟავების N- 139
გლიკოზილირება ზოგიერთი ნახშირწყლებით*

ფიზიკური ქიმია

ნ.ყალბაგაშვილი, დ.იოსელიანი, გ.ბალარჯიშვილი, ლ.სამხარაძე, თ.ქორქია, ო.მხეიძე. 140
ფურფუროლის მიღება D-ქსილოზის დეჰიდრატაციით, H-კლინობტილოლიტის თანაობისას

*რ.თუმურაშვილი, მ.ფანჩვიძე, ც.ბასილაძე, გ.ხიდეშელი, გ.შანიძე, მ.მამარდაშვილი, 144
ნ.კვიციანი.* სხვადასხვა პროტექტორის შერჩევა ზოგიერთი ორგანული საღებრის სტაბილიზაციისათვის ოზონის ზემოქმედებისგან დაცვის მიზნით

ე.ქაჩიბაია, რ.იმნაძე, თ.პაიციძე, დ.ძანაშვილი, თ.მაჩალაძე, ე.კვარაცხელია. ლითიუმის, 152
მანგანუმისა და ნიკელის აცეტატების, როგორც ლითიუმ-იონური აკუმულატორებისათვის საკათოდე მასალების მისაღები საწყისი რეაგენტების, თერმული თვისებები*

ნ.ენუქიძე. ხარისხობრივი მწკრივების გამოყენება კაპილარობის განტოლების 159
ამოხსნისათვის*

დ.ერისთავი, ა.სარუნაშვილი, ა.გოგოშვილი, მ.გუგეშიძე. BCl_3-CH_4 სისტემის 164
ურთიერთქმედებების თერმოდინამიკური ანალიზი*

*ა.ფაშაევი, ო.დავარაშვილი, მ.ენუქაშვილი, ზ.ახვლედიანი, რ.გულიაევი, ლ.ბიჩკოვა, მ.მაგანია, 171
ვ.ზლომანოვი.* ანიონის ქვემესერში ჩანაცვლებული $A^{IV}B^{VI}$ ნახევარგამტარების მყარი ხსნარები*

ი.ბერძენიშვილი. თავისუფალი ენერჯის ცვლილება ცხიმოვანი მჟავების ორ სხვადასხვა 173
გამხსნელს შორის გადასვლისას*

კ.ხაჩატურიანი, ნ.გეგია. ორგანოწარმოებული ბენტონიტური თიხების დაყოფითი 179
უნარიანობა*

*ა.ფაშაევი, ო.დავარაშვილი, მ.ენუქაშვილი, ზ.ახვლედიანი, რ.გულიაევი, ლ.ბიჩკოვა, მ.მაგანია, 186
ვ.ზლომანოვი.* კრისტალური მესრის პარამეტრი როგორც $A^{IV}B^{VI}$ ნახევარგამტარების ტექნოლოგიის და თვისებების ინდიკატორი*

* რეზიუმე

მათემატიკური ქიმიის

ნ.კუპატაძე, გ.ოთინაშვილი, მ.გვერდწითელი. ალკანების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა 187
ქვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

კ.კუპატაძე, მ.გვერდწითელი. $[Co(NH_3)_5Hal]^{2+} + V^{2+}$ რედოქს რეაქციების მათემატიკურ- 189
ქიმიური გამოკვლევა ბლოკ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

კოორდინაციულ ნაერთთა ქიმიის

ნ.მიხალიფი. კომპლექსები ბის(2,4-ბის(ტრიქლორმეთილ)-1,3,5-ტრიაზაპენტადიენატო)-M(II) 197
(M = Cu და Ni), როგორც სუპრამოლეკულური სტრუქტურების ასაგებად
სასარგებლო სინტონები*

ფარმაკოქიმიის

ვ.ნებიერიძე. *Tribulus terrestris* – კუროსთავის ცალკეული ვეგეტატიური ორგანოების 198
გამოკვლევა

ქ.შალაშვილი, მ.სუთიაშვილი, თ.სალარიშვილი, ნ.ქავთარაძე, ჯ.ანელი, მ.ჭურაძე, მ.ალანია. 207
საქართველოში მოზარდი ზოგიერთი მცენარის წინასწარი გამოკვლევა
ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების შემცველობაზე*

ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებები

ნ.აბულაძე, პ.იავინი, მ.ჯავახია, ლ.ჭურაძე, ე.ზურციძე. იოდის, როგორც იოდდეფიციტის 212
მკურნალობისა და რადიაქტიური დაცვის საშუალების გამოყენების
შესაძლებლობის კვლევა*

ნავთობის ქიმიის

ნ.ნონიკაშვილი, ნ.ქავთარაძე, ზ.ამირიძე, თ.უჩანეიშვილი. მწარეხევის * საბადოს ნავთობის 214
კვლევა

ე.თოფურია, ნ.ხეცურიანი, ზ.გონგლაშვილი, ე.უმარაული, ქ.გოდერძიშვილი, 217
ი.მჭედლიშვილი, მ.ჩხაიძე, ზ.მოლოდინაშვილი. ადგილობრივი მეორადი
ნედლეულის ბაზაზე საბრიკეტე კომპოზიციების შემუშავება, საცდელი
ბრიკეტების დამზადება და მათი ზოგიერთი მახასიათებლის შესწავლა

აბრარული ქიმიის

ო.ლომთაძე, გ.ჩიმაკაძე, ქ.ებრაღიძე, ნ.შალვაშვილი, ა.რამიშვილი. ცხოველთა 222
ექტოპარაზიტების საწინააღმდეგო ახალი ეფექტური პრეპარატი „ვიომეტრინი“

ბარემოს ქიმიის

მ.კიკალიშვილი, მ.კუხალიშვილი. წყალტუბოს რაიონის სოფელ გვიშტიბის მტკნარ 225
წყლებში ქლორისა და იოდის რაოდენობის განსაზღვრა

ე.შაფაქიძე, რ.სხვიტარიძე, ლ.ვაბუნია, ი.ქაბუშაძე, ი.გვეჯაძე. მოსალოდნელი „თიხაფიქალური 230
ეკოლოგიური კატასტროფა“ და მისი პრევენციის ტექნოლოგიური გზები

ქიმიური ეკოლოგია

ა.დოლიძე, ზ.ალავიძე, მ.გოდერძიშვილი, ი.მიქაძე, ნ.ქავთარაძე, ლ.დოლიძე. 237
ანტიოქსიდანტების პერსპექტიული პრეპარატული ფორმების მიღება თხილის
მწვანე უმწიფარი ნაყოფებიდან*

ტექნოლოგია

თ.წიფწივაძე, ნ.ჩიგოვიძე, რ.კლდიაშვილი, რ.სხილაძე, გ.სულაქველიძე. ახალი თაობის 238
სამკურნალო-პროფილაქტიკური კვების პროდუქტები

კვიტრომას 2014 242

ინფორმაცია ავტორებისათვის 251

* რეზიუმე

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

ქეთევან კუპატაძე, მიხეილ გვერდწითელი*

ილიას სახელმწიფო უნივერსიტეტი

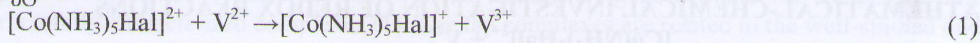
*ივანე ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ბლოკ-მატრიცის მეთოდის ფარგლებში ჩატარებულია ზოგიერთი რედოქს რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. შემუშავებულია კორელაციური განტოლება. კორელაცია დამაკმაყოფილებელია.

ტოპოლოგიური ინდექსების (მოლეკულური დისკრიპტორების) მეთოდი წარმატებით გამოიყენება მათემატიკურ ქიმიაში მოლეკულებისა და მათი გარდაქმნების შესასწავლად [1-2]. ამჟამად არსებობს ხუთ ათეულზე მეტი ტოპოლოგიური ინდექსი, რომელთა მნიშვნელოვანი ნაწილი აგებულია მოლეკულური გრაფების თანაზიარობის მატრიცების ამა თუ იმ მოდიფიკაციის ბაზაზე [3].

ჩვენს მიერ შემუშავებული და აპრობირებულია ოთხი ახალი ტოპოლოგიური ინდექსი, რომლებიც კონსტრუირებულია ანბ-, ქვაზი-ანბ-, ფსევდო-ანბ- და ეპ-მატრიცების საფუძველზე [4-5]. აღსანიშნავია, რომ ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდი სპეციფიკურ სირთულეს აწყდება კოორდინაციული ნაერთებისა და მათი გარდაქმნების შესწავლისას. სწორედ ამ პრობლემის გადაჭრის ერთ-ერთი მიდგომა წარმოჩენილი წარმოდგენილ კვლევაში.

კოორდინაციული ნაერთების ისეთი ჯგუფის დახასიათებისთვის, 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 (lgk) მონაცემები [6]. გამოკვლეულია კორელაცია [Co(NH₃)₅Hal] სტრუქტურასა და შესაბამის lgk-ს მნიშვნელობებს შორის.

კომპლექსური კათიონისთვის შემუშავებულია მოდელი:

$$B-X \quad (2)$$

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

$$\begin{vmatrix} Z_B & 1 \\ 1 & Z_X \end{vmatrix} \quad (3)$$

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

ცხრილში 1 მოცემულია lg(Δბ) და lgk მნიშვნელობები განხილული სისტემებისთვის.

ცხრილი 1. lg(Δბ) და lgk

კომპლექსური კათიონი	lg(Δბ)	lgk
[Co(NH ₃) ₅ F] ²⁺	2,84	0,415
[Co(NH ₃) ₅ Cl] ²⁺	3,12	0,568
[Co(NH ₃) ₅ Br] ²⁺	3,42	1,406
[Co(NH ₃) ₅ I] ²⁺	3,61	2,080

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპიუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\lg k = 1,700 \lg(\Delta j) - 4,414 \quad (4)$$

კორელაციის კოეფიციენტი $r=0,991$. ასე რომ, ჯაფეს კრიტერიუმით [7] ადგილი აქვს კარგ კორელაციას.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. გ.გამზიანი. მათემატიკური ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, მეცნიერება, 1990. გვ.113 (25-38).
2. გ.გამზიანი, ნ. კობახიძე, მ.გვერდწითელი. ზოგი რამ ტოპოლოგიური ინდექსების შესახებ. თბილისი, თსუ გამომცემლობა, 1995. გვ. 33.
3. M.Gverdsiteli, G.Gamziani, I. Gverdsiteli. The Contiguity Matrices of Molecular Graphs and their Modifications. Tbilisi, Tb. Univ. Press. 1996. p.38.
4. Н.Н. Сидамонидзе, К.Т. Купатадзе, М.И. Гвердцители. Теоретическое исследование корреляции “структура- свойства” в рамках методов ПНС-, квази- ПНС- и ЭП- матриц. Прикладная Физика, 2009, #6. Стр. 36-39.
5. K.Kupatadze, T.Lobzhanidze, M.Gverdsiteli. Algebraic-chemical Investigation of some Organic Molecules and their Transformations. Tbilisi, Publ. House “Universal”, 2007. p.21.
6. Е.Т.Денисов. Константы скорости гомологических низкофазных реакций. Москва., “Наука”, 1971, стр.679 (597-599).
7. მ.გვერდწითელი. ფიზიკური ორგანული ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, თსუ გამომცემლობა, 1982. გვ.19.

MATHEMATICAL-CHEMICAL INVESTIGATION OF REDOX REACTIONS [Co(NH₃)₅Hal]²⁺ + V²⁺ WITHIN THE SCOPE OF BLOCK-MATRICES METHOD

Ketevan Kupatadze, Mikheil Gverdsiteli*
Ilia State University
*Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Within the scope of Block-matrices method four redox reactions were investigated. The correlation equation was constructed. Calculations show that correlation is satisfactory.

МАТЕМАТИКО - ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕДОКС РЕАКЦИЙ [Co(NH₃)₅Hal]²⁺ + V²⁺ В РАМКАХ МЕТОДА БЛОК МАТРИЦ

К.Т.Купатадзе, М.И.Гвердцители*
Государственный университет им И. Чавчавадзе
*Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

В рамках метода блок- матриц проведено математико-химическое исследование некоторых редокс реакций. Построено корреляционное уравнение. Корреляция удовлетворительна.