

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

ტომი
Volume 42 № 1
Том

ჟურნალი დაარსდა 1975 წელს
The Journal is founded in 1975
Журнал основан в 1975 году

წელიწადში 4 ნომერი
4 numbers annually
4 номера в год

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

2016

შინაარსი

ელექტროქიმია

თ.როყვა, თ.ჩაზუნაშვილი, დ.ძანაშვილი, ნ.ბუთიაშვილი, შ.მახათაძე. ნიტრატული 9
 ხსნარებიდან ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდის მიღების პირობებში
 ანოდზე მიმდინარე პროცესების კვლევა

თ.როყვა, თ.ჩაზუნაშვილი, დ.ძანაშვილი, მ.ფაჯიშვილი, ლ.როყვა. მანგანუმის ნიტრატის 13
 ხსნარების ელექტროლიზის დროს კათოდზე მიმდინარე წყალბადის გამოყოფის
 პროცესის კვლევა

ფიზიკური ქიმია

ნ.ყალბაგვაშვილი, გ.ბალარჯიშვილი, დ.იოსელიანი, ლ.სამხარაძე, ლ.დოლიძე. 16
 ფურფუროლის მიღება D-ქსილოზას დეჰიდრატაციით ჰეტეროგენული
 კატალიზატორების თანაობისას

ა.ფორჩხიძე. პოლიეთილენტერეფტალატის სიმტკიცის შესწავლა მისი მექანოქიმიური 20
 დესტრუქციის დროს

თ.ქაბუაძე, შ.პირიანაშვილი, ნ.კეკელიძე, ზ.ჩუბინაშვილი, ლ.ვაბრიჭიძე. ქრომიტ და 22
 ტელურიტ ლეგირების თავისებურებანი ნახევრადიზოლირებული GaAs-ის
 ზრდის პროცესში

თ.მაჩალაძე, მ.სამხარაძე, ნ.კახიძე. ბორის კარბიდის ჟანგვის პროცესის თავისებურებანი 24

ე.დელაღლუტაშვილი, ა.რჩელიშვილი. ბიოსორბცია Cr(VI)-ის *Arthrobacter globiformis* მიერ 29
 ბაქტერიის ზრდის პროცესში Zn(II)-ის იონების თანაობისას და ბიოსორბცია
 Zn(II)-ის იონების *Arthrobacter globiformis* მიერ*

ე.ქაჩიაია, რ.იშანაძე, თ.პაიკიძე, დ.ძანაშვილი, თ.მაჩალაძე, ე.კვარაცხელია. $\text{LiM}_x\text{Ni}_{0.5-x}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ 34
 ტიპის, სადაც $M=\text{Co}+\text{Cr}, \text{Al}$ და Cu ; $0 < x \leq 0.4$, ლითიუმ-ნიკელ-მანგანუმისანი
 შპინელეები, როგორც Li-იონური აკუმულატორების საფუძველზე Li-ბატარების
 პერსპექტიული საკათოდე მასალები*

ვ.ციციშვილი, ნ.დოლაბერიძე, ნ.პირძელო, მ.ნიჟარაძე. მორდენიტის ტიპის სინთეზური 39
 ცეოლითური მასალები*

რ.ჯანელიძე, ი.ბლაგიძე, ვ.მშველიძე, ნ.პაპუნაშვილი, ო.გოგოლონი, ე.ციციშვილი. ZnO 45
 ნანოფხვნილების ტაბლეტების ელექტრული გამტარებლობა*

კ.ხაჩატურიანი, ნ.გეგია, ვ.ენუქიძე, თ.გურული. ბენტონიტური თიხების გაჯირჯევალობის 51
 დამოკიდებულება ქიმიური რეაგენტების ბუნებაზე*

მათემატიკური ქიმია

მ.გვერდწითელი, ლ.ლობჯანიძე. აცეტილენის ტეტრამერიზაციის და 52
 ციკლოტეტრამერიზაციის რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

მარინა ქარჩხაძე, ქეთევან კუპატაძე, მიხეილ გვერდწითელი. ფენილალანინის თიროზინად 55
 გარდაქმნის რეაქციის მათემატიკურ-ქიმიური კვლევა

კომპლექსნაერთთა ქიმია

ი.ბეშვენაძე, ნ.ჟორჯოლიანი, მ.გოგალაძე, ნ.კლარჯეიშვილი, ლ.გოგუა, ს.უროტაძე, 57
ვ.ციციშვილი. ქრომის ხელატების სინთეზი

* რეზიუმე

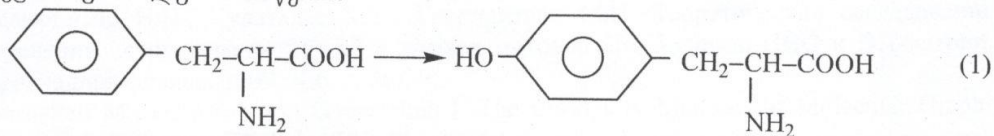
მათემატიკური ქიმია

ფენილალანინის თიროზინად გარდაქმნის რეაქციის მათემატიკურ-ქიმიური კვლევა

მარინა ქარჩხაძე, ქეთევან კუპატაძე, მიხეილ გვერდწითელი

ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
ილიას სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ფენილკეტონურია მემკვიდრეობითი დაავადებაა, რომლის დროსაც ორგანიზმში არ გამოიშავდება ის ფერმენტი, რომელიც ფენილალანინს გარდაქმნის თიროზინად [1]. ამ რეაქციის ფორმალური ჩანაწერია:

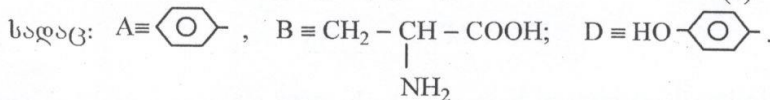


ამ პროცესის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ჩატარებულია კვაზი-ანბ-მატრიცების და შენონის ინფორმაციის ენტროპიის მეთოდების ფარგლებში [2].

კვაზი-ანბ-მატრიცა (ანბ) წარმოადგენს ანბ-მატრიცის სახეცვლილებას. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულის ცალკეულ სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრების ჯამი, არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიური ბმების ჯვრადობები სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის [3]. ამგვარად, ანბ-მატრიცის აგება ხდება მოლეკულის გარკვეული მოდელის საფუძველზე, რომლის ოპტიმალური შერჩევა შესაძლებელია მოცემული ამოცანის ქიმიური სპეციფიკის გათვალისწინებით [4].

(1) რეაქციისათვის შემუშავებულია ორფრაგმენტიანი უმარტივესი მოდელი:

$$A - B \rightarrow D - B \quad (2)$$



(2) სქემის ჩანაწერს ანბ-მატრიცების გამოყენებით გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_A & 1 \\ 1 & Z_B \end{vmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix} Z_D & 1 \\ 1 & Z_B \end{vmatrix} \quad (3)$$

განვიხილოთ გამოსახულება:

$$\Delta_r = \Delta_f - \Delta_i \quad (4)$$

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

აღმოჩნდა, რომ განხილული რეაქციისთვის $\Delta_r > 0$. თუ გავითვალისწინებთ, რომ Δ -ს სიდიდე მოლეკულური სირთულის [2] პროპორციულია, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ეს რეაქცია მიმდინარეობს მოლეკულური სირთულის ზრდით.

შენონის ინფორმაციის ენტროპია გამოითვლება ფორმულით:

$$H = -\sum p_i \log_2 p_i \quad (8)$$

სადაც: P_i – გარკვეული ხლომილების (მაგ.: A-სტრუქტურული ფრაგმენტის ალაბელზე „შეხვედრის“) ალაბობაა.

განვიხილოთ გამოსახულება:

$$H_r = H_f - H_i \quad (9)$$

სადაც: H_f – საბოლოო სისტემის შესაბამისი შენონის ინფორმაციის ენტროპია; H_i – საწყისი სისტემის; H_r – ინფორმაციის ენტროპიის ცვლილება რეაქციის პროცესში.

აღმოჩნდა, რომ ამ რეაქციას თან ახლავს ინფორმაციის ენტროპიის ზრდა ($H_r > 0$), სისტემის ინფორმატიულობა მადლდება.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Бреслер С.Е. Молекулярная биохимия. Ленинград, 1973. 405с.
2. გამზიანი გ. მათემატიკური ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, 1990. 125 გვ.
3. Сидамонидзе Н.Н., Купатадзе К.Т., Гвердцители М.И. Теоретическое исследование корреляции „структура-свойства“ в рамках методов ПНС-, квази-ПНС и ЭП-матриц. //Прикладная физика, 2009, №6, с. 36-39.
4. Gverdtsiteli M., Gamziani G., Gverdtsiteli I. The Contiguity Matrices of Molecular Graphs and their Modifications. Tbilisi, 1996; 21 p.
5. Яглом А.М., Яглом И.М. Вероятность и информация. Москва, 1981, 375 с.
6. Жданов Ю.А. Теория строения органических соединений. Москва, 1971; 271 с.

MATHEMATIC-CHEMICAL INVESTIGATION OF THE REACTION OF TRANSFORMATION OF PHENYLALANINE INTO TIROSINE

Marina Karchkhadze, Ketevan Kupatadze, Mikheil Gverdtsiteli
*Iv. Javakhishvili Tbilisi State University
 Iia State University*

SUMMARY

Within the scope of quasi-ANB-matrices method mathematic-chemical investigation of the reaction of transformation of phenylalanine into tirosine was carried out. This reaction proceed with the increase of molecular complexity. The informity of the system also increases.

МАТЕМАТИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ПРЕВРАЩЕНИЯ ФЕНИЛАЛАНИНА В ТИРОЗИН

Марина Карчхадзе, Кетеван Купатадзе, Михаил Гвердцители
*Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили
 Государственный университет им. И. Чавчавадзе*

РЕЗЮМЕ

В рамках метода квази-АНС-матриц проведено математико-химическое исследование реакции превращения фенилаланина в тирозин. Процесс протекает с увеличением молекулярной сложности. При реакции также увеличивается информативность системы.