საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მოამბე, ტ. 11, №1, 2017
BULLETIN OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES, vol. 11, no. 1, 2017

Organic Chemistry

Mathematical-Chemical Investigation of some Chloranhydrides of Carboxylic Acids

Neli Sidamonidze*, Mikheil Gverdtsiteli*, Levan Lobzhanidze*

* *Faculty of Exact and Natural Sciences, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia*

(Presented by Academy Member Shota Samsoniya)

ABSTRACT. Mathematical chemistry is a new branch of modern theoretical chemistry. By application of the categories of higher algebra (groups, graphs, matrices and etc) it investigates the problems of structural chemistry (molecules and their transformations). Mathematical-chemical investigation of some chloranhydrides of carboxylic acides was carried out within the scope of quasi-ANB-matrices method. The diagonal elements of quasi –ANB – matrix are the sums of the atomic numbers of those chemical elements, which the structural fragments of the molecule contain, nondiagonal ones are the multiplicities of the chemical bonds between the structural fragments. Thus quasi-ANB-matrices are constructed on the basis of molecular models. The decimal logarithm of the value of the determinant of quasi-ANB-matrix is effective molecular descriptor (topologic index) for construction of the correlation equations of "structure-properties" type. Three correlation equations were constructed. Correlations are satisfactory. Shannon's information entropies were calculated for these compounds. *©2017 Bull. Georg. Natl. Acad. Sci.*

Key words: chloranhydrides of carboxylic acids, quasi-ANB-matrix, correlation equation, information entropy

Mathematical chemistry is a new branch of modern theoretical chemistry. By effective application of the categories of higher algebra-groups, graphs, matrices – it investigates and solves many considerable problems of structural chemistry.

Contiguity matrices of molecular graphs and their modifications are widely used in mathematical chemistry and ANB-matrix falls into this type [1-4].

The diagonal elements of ANB-matrix are the atomic numbers of the chemical elements, nondiagonal ones are the multiplicities of the chemical bonds. For arbitrary XYV molecule ANB – matrix has the form:

$$\begin{Vmatrix} Z_x & \Delta_{xy} & \Delta_{xv} \\ \Delta_{xy} & Z_y & \Delta_{yv} \\ \Delta_{xv} & \Delta_{yv} & Z_v \end{Vmatrix}$$

where Z_x, Z_y, Z_v are the atomic numbers of X, Y, V

© 2017 Bull. Georg. Natl. Acad. Sci.

Table

$\lg(\Delta_{A\tilde{N}B})$, T_{boil}, d_4^{20}, n_D^{20} and H_s for chloranhydrides of carboxylic acids

Compound	$\lg(\Delta A\tilde{N}B)$	T_{boil}	d_4^{20}	n_D^{20}	H_s
CH_3COCl	2.56	52	1.105	1.3897	1.8427
C_2H_5COCl	2.72	80	1.065	1.4051	1.6855
C_3H_7COCl	2.82	102	1.026	1.4121	1.3792
C_4H_9COCl	2.90	128	1.016	1.4155	1.4904

chemical elements; $\Delta_{xy}, \Delta_{xv}, \Delta_{yv}$ are the multiplicities of X~Y, X~V, Y~V chemical bonds.

The modernized form of ANB – matrix – quasi – ANB – matrix ($A\tilde{N}B$) was elaborated. Its diagonal elements represent the sums of the atomic numbers of those chemical elements, which the structural fragments of the molecule contain; nondiagonal elements are the multiplicities of the chemical bonds between the structural fragments. Thus $A\tilde{N}B$– matrix is constructed on the basis of molecular model and it is an innovatory approach in mathematical chemistry.

Chloranhydrides of carboxylic acids were investigated within the scope of $A\tilde{N}B$–matrices method. The simplest model was elaborated for them:

$$X - Y,$$

where:

$$X \equiv CH_3CO,\ C_2H_5CO,\ C_3H_7CO.....;\ Y \equiv Cl.$$

Corresponding $A\tilde{N}B$–matrix has the form:

$$\begin{Vmatrix} Z_X & 1 \\ 1 & Z_Y \end{Vmatrix}.$$

In the Table the data of $\lg(\Delta_{A\tilde{N}B})$, T_{boil}, d_4^{20}, n_D^{20} and H_s (Shannon's entropy of information) are represented for these compounds [5].

Three correlation equations were constructed on computer:

$T_{boil}=220\lg(\Delta_{A\tilde{N}B}), -518.4$

$d_4^{20}=-0.390\lg(\Delta_{A\tilde{N}B}), +2.126$

$n_D^{20}=0.0799\lg(\Delta_{A\tilde{N}B}), +1.2147$

The correlation coefficient r is respectively equal to: 0.984; 0.982; 0.983. Thus, in accordance with Jaffe's criterions [6], correlations are satisfactory.

Shannon's information entropy can be calculated by formula

$$H_s = -\Sigma\, Pi \log_2 Pi,$$

where Pi is the ability of the event (for example, to "meet" in molecule Cl-atom) [7]. For these compounds the values of Hs were calculated and they are represented in the Table.

ორგანული ქიმია

ზოგიერთი კარბონმჟავას ქლორანჰიდრიდის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

ნ. სიდამონიძე*, მ. გვერდწითელი*, ლ. ლობჟანიძე*

** ივანე ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, თბილისი, საქართველო*

(წარმოდგენილია აკადემიის წევრის შ.სამსონიას მიერ)

მათემატიკური ქიმია თანამედროვე ქიმიის შედარებით ახალი განხრაა. უმაღლესი ალგებრის კატეგორიების (ჯგუფები, გრაფები, მატრიცები და სხვ.) გამოყენებით ის იკვლევს სტრუქტურული ქიმიის პრობლემებს (მოლეკულებს და მათ გარდაქმნებს).

ჩატარებულია ზოგიერთი კარბონმჟავას ქლორანჰიდრიდის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა კვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. კვაზი-ანბ-მატრიცის დიაგონალური ელემენტები იმ ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრების ჯამია, რომელსაც მოლეკულის ცალკეული სტრუქ-ტურული ფრაგმენტი შეიცავს; არადიაგონალური ელემენტებია ბმათა ჯერადობები ამ სტრუქ-ტურულ ფრაგმენტებს შორის. ამგვარად, კვაზი-ანბ-მატრიცა იგება მოლეკულური მოდელის საფუძველზე, რაც ნოვატორული მიდგომაა მათემატიკურ ქიმიაში. კვაზი-ანბ-მატრიცის დეტერ-მინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი წარმოადგენს ეფექტურ მოლეკულურ დისკრიპტორს (ტოპოლოგიურ ინდექსს) „აღნაგობა-თვისებები“ ტიპის კორელაციური განტოლებების ასაგებად. აგებულია სამი კორელაციური განტოლება ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფი-ლებელია. ამ ნაერთებისათვის გამოთვლილია შენონის ინფორმაციის ენტროპიის მნიშვნელობები.

REFERENCES

1. *Gverdtsiteli M., Gamziani G., Gverdtsiteli I.* (1996) The Contiguity Matrices of Molecular Graphs and their Modifications. Tbilisi.
2. *Kupatadze K., Lobzhanidze T., Gverdtsiteli M.* (2007) Algebraic-chemical Investigation of some Organic Molecules and their Transformations. Tbilisi.
3. *Sidamonidze N., Gverdtsiteli M.* (2016) Inzhenernaia fizika. Graphs: "symmetric star", "pseudosymmetric star", "asymmetric star" and their application in mathematic chemistry, 6: 94-98. M. (in Russian).
4. *Gverdtsiteli M., Machaidze Z., Sidamonidze N.* (2016) Engineering physics. Inzhenernaia fizika. 10: 65-67. M. (in Russian).
5. *Nesmianov A.N., Nesmianov N.A.* (1969) Nachalo organicheskoi khimii. M. (in Russian).
6. *Gverdtsiteli M.* (1982) Physical Organic Chemistry. Tbilisi (in Georgian).
7. *Djdanov Yu.* (1971) Teoriia stroeniia organicheskikh soedinenii. M. (in Russian).

Received November, 2016