საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მოამბე, ტ. 12, №1, 2018
BULLETIN OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES, vol. 12, no. 1, 2018

Organic Chemistry

Mathematical-Chemical Investigation of some Derivatives of N-Methyl-3-Formyl-2-Phenylindole

Shota Samsoniya*, Nino Chikvaidze, Ioseb Chikvaidze§, Mikheil Gverdtsiteli§**

**Academy Member, Georgian National Academy of Sciences, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia*
*** Faculty of Natural Sciences and Healthcare, Sokhumi State University, Tbilisi, Georgia*
§Faculty of Exact and Natural Sciences, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia

ABSTRACT. Mathematical chemistry is a new branch of modern theoretical chemistry. By application of the categories of higher algebra (graphs, groups, matrices and etc) it investigates the molecules and their transformations (chemical reactions). Mathematical-chemical investigations of some derivatives of N-methyl-3-formyl-2-phenylindole was carried out within the scope of quasi-ANB-matrices (AÑB -) method. The diagonal elements of AÑB -matrix are the sums of the atomic numbers of those chemical elements contained in the structural fragments of the molecule; nondiagonal ones are the multiplicities of the chemical bonds between the structural fragments. Thus AÑB matrices are constructed on the basis of molecular models. The decimal logarithm of the value of the determinant of AÑB -matrix is effective topologic index (molecular descriptor) for construction of the correlation equations of "structure-properties" type. Two correlation equations were constructed. Correlation is satisfactory.**© 2018 Bull. Georg. Natl. Acad. Sci.*

Key words: N-methyl-3-formyl-2-phenylindole, quasi- ANB-matrix, correlation equation

Mathematical-chemistry is a new branch of modern theoretical chemistry. By effective application of the categories of higher algebra (graphs, groups, matrices and etc), mathematical-chemistry investigates and solves many problems of structulral chemistry - chemical statics (molecules) and chemical dynamics (reactions) [1,2].

Contiguity matrices of molecular graphs and their different modifications are widely used in mathematical chemistry and ANB-matrix falls into this type [3,4].

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

$$\begin{Vmatrix} Z_X & \triangle_{XY} & \triangle_{XV} \\ \triangle_{XY} & Z_y & \triangle_{YV} \\ \triangle_{XV} & \triangle_{YV} & Z_V \end{Vmatrix}$$

where: Z_x, Z_y, Z_v- are the atomic numbers of X, Y, V chemical elements: Δ_{xy}, Δ_{xv}, Δ_{yv} - are multiplication of X~ Y, X~ V, Y~ V chemical bonds.

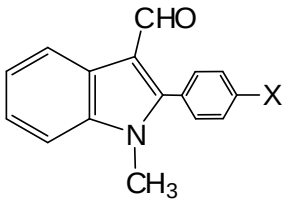
Topologic indices (molecular discriptors) are mathematical constructions and correlation equations of "structure-properties" type can derive on their basis [5].

© 2018 Bull. Georg. Natl. Acad. Sci.

One of the effective topologic indices is the decimal logarithm of the value of the determinant of ANB-matrix-lg (Δ_{ANB}). More than 40 chemical systems were investigated within the scope of this approach [1-3].

The simplified form of ANB-matrix-quasi-ANB-matrix (AÑB) was elaborated. Its diagonal elements represent the sums of the atomic numbers of those chemical elements contained in the structural fragments of the molecule; nondiagonal ones are the multiplicities of the chemical bonds between the structural fragments: Thus AÑB - matrix is constructed on the basis of molecular models and it is an innovatory approach in mathematical chemistry.

Three derivatives of N-methyl-3-formyl-2-phenylindoles were investigated within the scope of AÑB -matrices method. Their general formula is:



where: $X \equiv OCH_3$, Br, C_6H_6.

The simplest model was elaborated for them:

Y–X

(Y is the main structural fragment of the molecule).

Corresponding AÑB - matrix has the form:

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

We have investigated the opportunity of $\lg(\Delta_{AÑB})$ usage as topologic index for N-methyl-3-formyl-2-phenylindoles.

In the Table the data of $\lg(\Delta_{AÑB})$,T_{melt}. and R_f are represented for these three compounds.

Table.

$\lg(\Delta_{AÑB})$, T_{melt}, R_f for three derivatives of N-methyl-3-formyl-2-phenylindole

X	$\lg(\Delta_{AÑB})$	T_{melt}.^{0} C	R_f
OCH3	3.27	140	0.40
Br	3.59	157	0.42
C_6H_5	3.66	175	0.43

Two correlation equations were construced on computer:

$$T_{meet} = 90\ \lg(\Delta_{AÑB}) - 154$$

$$R_f = 0.07\ \lg(\Delta_{AÑB}) + 0.17$$

The correlation coefficient r-is respectively equal to 0.982, 0.981. Thus in accordance with Jaffes criterium [6], the correlation is satisfactory. Thus, $\lg(\Delta_{AÑB})$ is also effective topologic index

.

ორგანული ქიმია

N-მეთილ-3-ფორმილ-2-ფენილინდოლის ზოგიერთი ნაწარმის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევები

შ. სამსონია*, ნ. ჩიკვაიძე, ი. ჩიკვაიძე§, მ. გვერდწითელი§**

**აკადემიის წევრი, ივანე ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, თბილისი, საქართველო*
*** სოხუმის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა და ჯანდაცვის ფაკულტეტი, თბილისი, საქართველო*
§ ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ქიმიის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, თბილისი, საქართველო

მათემატიკური ქიმია თანამედროვე თეორიული ქიმიის შედარებით ახალი განხრაა. უმაღლესი ალგებრის კატეგორიების (გრაფები, ჯგუფები, მატრიცები და სხვ.) გამოყენებით მათემატიკური ქიმია იკვლევს თეორიული ქიმიის პრობლემებს - ქიმიურ სტატიკას (მოლეკულებს) და ქიმიურ დინამიკას (რეაქციებს). ჩატარებულია N-მეთილ-3-ფორმილ-2-ფენილინდოლის სამი ნაწარმის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა კვაზი-ანბ-მატრიცების (ანბ) მეთოდის ფარგლებში. ANB - მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია იმ ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრების ჯამი, რომელსაც მოლეკულის ცალკეული სტრუქტურული ფრაგმენტი შეიცავს; არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიურ ბმათა ჯერადობები ამ სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის, ამგვარად, ANB-მატრიცის აგება ხდება მოლეკულური მოდელის საფუძველზე, რომლის შერჩევა ხდება ამოცანის ქიმიური სპეციფიკის საფუძველზე, რაც ნოვატორული მიდგომაა მათემატიკურ ქიმიაში (წინაა წამოწეული ამოცანის ქიმიური ასპექტი).

ANB-მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობითი ლოგარითმი ეფექტურ ტოპოლოგიურ ინდექსს (მოლეკულურ დისკრიპტორს) წარმოადგენს „აღნაგობა-თვისებები“ ტიპის კორელაციური განტოლებების ასაგებად. აგებულია ორი კორელაციური განტოლება. ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

REFERENCES

1. Gverdtsiteli M., Rusia M., ChaChava G. (2010) Mathematical-Chemical Investigations of some Classes of Inorganic and Organic Compounds. Tbilisi.
2. Kupatadze K., Lobthanidze T., Gvedtsiteli M. (2007) Algebric-chemical Investigation of some Organic Molecules and their Transfomations. Tbilisi.
3. Gverdtsiteli M., Gamziani G., Gverdtsiteli I. (1996) The Contiguity Matrices of Molecular Groups and their Modifications. Tbilisi.
4. Gverdtsiteli M., Machaidze Z., Sidamonidze N. (2016) Matematiko-khimicheskoe issledovanie elektroprovodimostei Ph_4PCl i Ph_4BBr v spirtovykh rastvorakh. *Engineering phisics (Inghinernaia fizika)*, 10: 65-67. M. (in Russian).
5. Kobakhidze N., Gverdtsiteli M., and etc. (1997) Correlations “Structure-properties” in Algebrous Chemistry. Tbilisi.
6. Gverdtsiteli M. (1982) Physical Organic Chemistry. Tbilisi (in Georgian).

Received January, 2018