

ვალენტური იზომერების ალგებრული მახასიათებლები

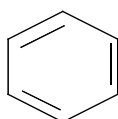
ანზ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში

მ. გვერდწითელი^ა, თ. ლობჯანიძე^ბ

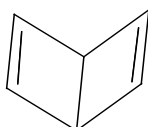
ელ-ფოსტა: tea.lobzhanidze@tsu.ge

^{ა,ბ} ქიმიის დეპარტამენტი, ზუსტი და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა
ფაკულტეტი,
ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი,
ი. ჭავჭავაძის 3

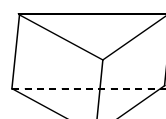
ვალენტური იზომერები ერთმანეთისგან განსხვავდება ქიმიური ბმების განლაგებით, ამიტომ მათ ზოგჯერ „ბმების იზომერებს“ უწოდებენ. ქვემოთ მოცემულია ბენზოლის ექვსი ვალენტური იზომერი:



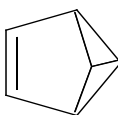
ბენზოლი
7744



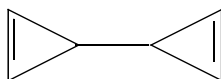
დიუარის ბენზოლი
8400



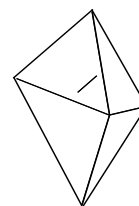
პრიზმანი
10800



ბენზვალენი
9856



ბიციკლოპროპენი
9360



ბენზ-მეზიუს ტრიპტანი
10000

ეს იზომერები შეიძლება მათემატიკურ-ქიმიურადაც დახასიათდეს ანზ-მატრიცების ფარგლებში. ანზ-მატრიცები წარმოადგენს თანაზიარობის მოდიფიცირებულ სახესხვაობას. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრები; არადიაგონალური-ქიმიური ბმების ჯერადობები. XYV სამატომიანი მოლეკულის შესაბამისი ანზ-მატრიცაა:

$$\begin{vmatrix} 2X & \Delta xy & \Delta xv \\ \Delta xy & 2y & \Delta yv \\ \Delta xv & \Delta yv & 2v \end{vmatrix}$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ ანზ-მატრიცების დეტერმინანტების მნიშვნელობები ბენზოლის ვალენტური იზომერებისათვის ერთმანეთისაგან განსხვავდება (ისინი ბენზოლის ვალენტური იზომერების ქვემოთაა მოყვანილი) და ამგვარად შეიძლება განვიხილო თითოეული ვალენტური იზომერის ალგებრული მახასიათებელი.