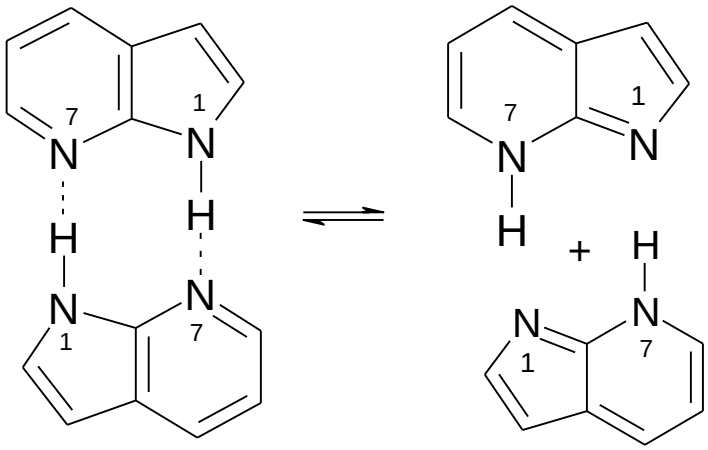
ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების ელექტრონული სტრუქტურისა და რეაქციის უნარიანობის შესწავლა კვანტური ქიმიის თანამედროვე მეთოდის - სიმკვრივის ფუნქციონალური თეორიის (DFT – Density Functional Theory) გამოყენებით

ჯუმბერ კერესელიძე

ელ-ფოსტა: jumber.kereselidze@tsu.ge
ქიმიის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი,
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
თბილისი, 0179, ი. ჭავჭავაძის გამზ. 3

თანამედროვე მოლეკულური მეცნიერების ერთ-ერთი ყველაზე პოპულარული სფეროა ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების ელექტრონული სტრუქტურისა და რეაქციის უნარიანობის შესწავლა კვანტური ქიმიის თანამედროვე მეთოდის - სიმკვრივის ფუნქციური თეორიის (DFT) გამოყენებით. ჩვენს მიერ ამ სფეროში ჩატარებული კვლევები წარმატებული და აქტუალურია. კერძოდ, აგებულია ამინომჟავების მიერ პეპტიდური ბმის წარმოქმნის უნარიანობის მიდრეკილების ფორმულა, სადაც Δq არის სხვაობა პეპტიდური ბმის ნახშირბადის და აზოტის ატომების მუხტებს შორის, R_{NH} , R_{CO} და P_{NH}, P_{CO} და NH და CO ბმის სიგრძე და ბმის რიგები. $\Delta E^{\#}$ - პეპტიდური ბმის წარმოქმნის აქტივაციის ენერგია.

$$\mathbf{K_p = \frac{\Delta q \cdot R_{NH} \cdot R_{CO}}{P_{NH} \cdot P_{CO} \cdot \Delta E^{\#}}}$$



$$\boldsymbol{\nu = \frac{C}{\lambda} = C\bar{\nu} = 3 \cdot \frac{10^{10} cm}{sec} 3300 cm^{-1} = 10^{14} sec^{-1},}$$

$$\boldsymbol{t = \frac{1}{\nu} 10 \cdot 10^{-15} sec = 10 femtosec}$$