

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო
უნივერსიტეტი



თეონა რობაქიძე

ტუტე-მეტალების ალუმინჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური

გამოკვლევა

ზოგადი ქიმია

ნაშრომი შესრულებულია ქიმიის მეცნიერებათა მაგისტრის

ხარისხის მოსაპოვებლად

ხელმძღვანელები: ასოც. პროფ. მიხეილ გვერდწითელი

ასისტ. პროფ. ქრისტინე გიორგაძე

თბილისი

2019

სარჩევი

ანოტაცია	3
Abstract	3
შესავალი	4
1. მათემატიკური ქიმიის ალგებრული აპარატის ელემენტები [8]	5
2. ტოპოლოგიური ინდექსები [9-13]	9
3. ტუტე-მეტალების ალუმინჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქანქ- მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [14].....	13
გამოყენებული ლიტერატურა.....	15

ანოტაცია

მათემატიკური ქიმიის პოზიციიდან, ტოპოლოგიური ინდექსების მეთოდის გამოყენებით, აღწერილია „სტრუქტურა-თვისებები“ ტიპის კორელაციურ განტოლებების აგება და ანალიზი.

ქანბ-მეტრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია ტუტე-ლითონების ალუმინჰიდრიდები - $M[AlH_4]$. აგებულია ორი კორელაციური განტოლება $\lg(\Delta_{ქანბ})$ ტოპოლოგიური ინდექსის გამოყენებით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

Abstract

From the point of view of mathematical chemistry, within the scope topologic indices method, the construction and investigation of the “structure-properties” type correlation equations is described.

Alkali metals alumin hydrides - $Me[AlH_4]$, whiten the scope of QA NB-matrices are studied. Two correlation equations are derived. Correlations are satisfactory.

შესავალი

მათემატიკური ქიმია თანამედროვე თეორიული ქიმიის შედარებით ახალი განხრაა. ქიმიის ეს განხრა ჩამოყალიბდა ქიმიისა და მათემატიკის ერთგვარი სიმბიოზის შედეგად. მათემატიკური ქიმიის ძირითადი მიზანია თანამედროვე მათემატიკის უმძლავრესი გამოთვლით აპარატის (ჯგუფთა თეორია, გრაფების თეორია, მატრიცების თეორია, ინფორმაციის თეორია და სხვ.) გამოყენებით ქიმიის ფუნდამენტური ამოცანების გადაჭრა [1-4].

თანამედროვე მათემატიკური ქიმიის პრობლემატიკა ძალიან ვრცელია. მათ შორის განსაკუთრებით აქტუალურია ორი: 1. ტოპოლოგიური ინდექსების (მოლეკულური დისკრიპტორების) კონსტრუირება და მათ ბაზაზე „აღნაგობათვისებაში“ ტიპის კოლელატიური განტოლებების აგება და შესწავლა; 2) სხვადასხვა კლასის რეაქციის მათემატიკურ-ქიმიური სპეციფიკის ანალიზი. (ე.წ. „სირთული“ ცვლილება, ინფორმატიულობის ცვლილება და სხვ.)

საქართველოში მათემატიკური ქიმიის ჩასახვის თარიღად პირობითად შეიძლება მივიჩნიოთ 1983 წელი, როდესაც მ. გვერდწითელის წიგნში „ორგანულ ნაერთთა ნომენკლატური პრინციპები“ [5-9] შემუშავებული იყო მოლეკულათა მათემატიკური ჩაწერის ფორმულურ-ალგებრული მეთოდი გარკვეული მატრიცის სახით. დღეისათვის მათემატიკური ქიმიის ქართველი სპეციალისტების მიერ გამოქვეყნებულია ოთხასამდე სტატია ქართულ და უცხოურ სამეცნიერო ჟურნალებში, სამ ათეულზე მეტი მონოგრაფია. ხდება სპეციალისტების აქტიური მონაწილეობა რესპუბლიკურ და საერთაშორისო კონფერენციებზე.

სამაგისტრო ნაშრომში წარმოდგენილი შედეგები მიეკუთვნება პირველი ტიპის პრობლემატიკას და გამოქვეყნებულია ჟურნალში "საქართველოს საინჟინრო სიახლენი", 2018წ. 4 (88), გვ.66.

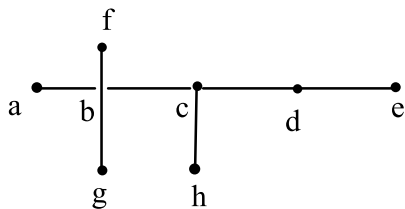
1. მათემატიკური ქიმიის ალგებრული აპარატის ელემენტები [8]

მათემატიკურ ქიმიაში გამოყენებული ძალზე ვრცელი მათემატიკური აპარატიდან განვიხილოთ გრაფები და მატრიცები.

1.1. გრაფები

გრაფი $G(V, X)$ შედგება p - წევრების შემცველი V სასრული სიმრავლისგან და V -ში შემავალი სხვადასხვა წევროების წყვილთა შემცველი X სიმრავლისგან. წევროების q წყვილებს გრაფის წიბო ეწოდება. წიბოს საშუალებით დაკავშირებულ წევროებს თანაზიარი წევროები ეწოდება.

(1)-ზე მოყვანილი გრაფისათვის:



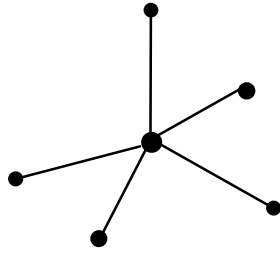
(1)

თანაზიარები არიან: a და b , b და c , c და d , d და e , b და f , b და g , c და h წევროები.

გრაფის წევროები ხასიათდება მათი ხარისხით - $\deg V_i$, რომელიც ტოლია მოცემული წევროს თანაზიარი წევროების რიცხვისა. 1-ლი გრაფიკისთვის 1-ის ტოლი ხარისხი გააჩნიათ a , e , f , g , h წევროებს-2-ის ტოლი ხარისხი გააჩნია d წევროს, სამის ტოლი ხარისხი გააჩნია c წევროს და 4-ის ტოლი ხარისხი გააჩნია b წევროს.

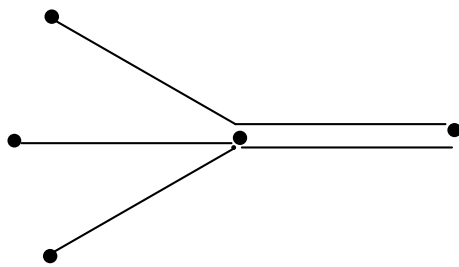
მათემატიკურ ქიმიაში გამოიყენება ჩვეულებრივი გრაფები, მულტიგრაფები და ნიშანდებული (შეფერელი) გრაფები.

გრაფს, რომლის წევროებშიც მხოლოდ თითო წიბოთია ერთმანეთთან შეერთებული ჩვეულებრივი გრაფი ეწოდება. (2)-ზე მოყვანილია ხუთწევრიანი ჩვეულებრივი გრაფი:



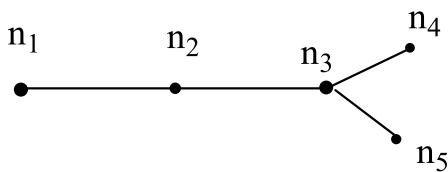
(2)

გრაფს, რომლის წვეროების თუნდაც ერთი წყვილი შეკავშირებულია ერთმანეთთან ჯერადი წიბოებით, მუსტიგრაფი ეწოდება. (3)-ზე წარმოდგენილი მულტიგრაფის ნიმუში:



(3)

ჩვეულებრივი გრაფები და მულტი გრაფები შეიძლება იყოს ნიშანდებული (გადანომრივი, შეფერილი). ნიშანდებული ეწოდება გრაფს, რომლის წვეროებიც ერთმანეთისაგან განსხვავდება რაიმე ნიშნით. ქვემოთ მოყვანილია ნიშანდებული გრაფი, რომლის წვეროებიც ერთმანეთისაგან განსხვავდება n -თან მდგომი ინდექსით:



(4)

1.2 მატრიცები

$m \times n$ განზომილების მატრიცა ეწოდება მართკუთხა ცხრილს, რომელიც შედგენილია d_{ij} რიცხვებისგან (სადაც $j=1, 2, 3, \dots, m$; ხოლო m და n ნატურალური რიცხვებია).

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \quad (5)$$

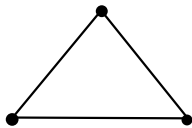
როდესაც $m=n$ მატრიცას კვადრატული ეწოდება, სადაც m (ან რაც იგივეა n) - მისი რანგია. (6) -სე გამოსახულია მეოთხე რანგის მატრიცა.

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad (6)$$

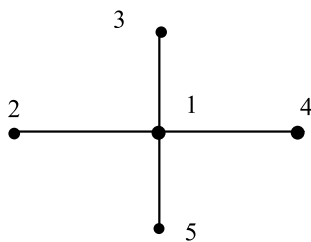
მატრიცის დიაგონალზე განლაგებულ ელემენტებს ($a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{44}$) დიაგონალური ელემენტები ეწოდება, დანარჩენ ელემენტებს - არადიაგონალური.

გრაფის ალგებრულად აღსაწერად ხშირად სარგებლობენ ე.წ. თანაზიარობის მატრიცით ამ მატრიცის დიაგონალური ელემენტები ნულეებია, არადიაგონალური ელემენტები ერთიანები და ნულიანები. თუ წვერო შეერთებულია (თანაზიარია) – „1“, თუ არა შეერთებული „0“.

ქვემოთ მოყვანილია ორი გრაფი და მათი შესაბამისი თანაზიარობის მატრიცები.



$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (7)$$



$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (8)$$

როგორც ვხედავთ, თანაზიარობის მატრიცის სვეტები შესაბამისი სტრიქონის ექვივალენტურია (I - სვეტი იგივეა რაც I-სტრიქონი, II სვეტი იგივეა და რაც II სტრიქონი და ა.შ.). ასეთ მატრიცებს სიმეტრიული ეწოდება.

2. ტოპოლოგიური ინდექსები [9-13]

საკითხი „მოლეკულის სტრუქტურა - თვისებები“ ქიმიის ძირძველი და ერთ-ერთი უმნიშვნელოვანესი პრობლემაა. ამ პრობლემის გადასაჭრელად მათემატიკურ ქიმიაში ეფექტურად იყენებენ შედარებით მარტივ, გარკვეულწილად ფორმალური ხასიათის მიდგომას, რომელსაც საფუძვლად უდევს მოლეკულების აღნაგობის ალგებრული ჩაწერა. მოლეკულის სტრუქტურის ასეთ აღწერას **ტოპოლოგიურ მიდგომას (მეთოდს)** უწოდებენ. ამ დროს მხედველობაში მიიღებს მხოლოდ ატომთა ტიპები და მათ შორის არსებული ბმების ჯერადობები (კლასიკური გაგებით). რაც შეეხება მოლეკულის მეტრიკულ მახასიათებლებს (ბმების სიგრძეები, კუთხეები ბმებს შორის) ისინი უგულვებელყოფილია.

ისეთ მათემატიკურ კონსტრუქციებს, რომლებიც რიცხობრივად ახასიათებენ მის აღნაგობას და არ არიან დამოკიდებულნი (ინვარიანტულები არიან) წვეროებისა და წიბოებს ნუმერაციაზე ტოპოლოგიურ ინდექსებს (მოლეკულურ დისკრიპტორებს) უწოდებენ.

ტოპოლოგიურ ინდექსებს T_1, T_2, \dots, T_N და მოლეკულის რომელიმე ფიზიკურ-ქიმიურ თვისებებს რიცხობრივ მახასიათებლებს - P -ს შორის შემდეგი ფუნქციური დამოკიდებულება არსებობს:

$$P = h_0 + h_1 T_1 + h_2 T_2 + \dots + h_i T_i \quad (9)$$

სადაც h_i რიცხობრივი კოეფიციენტი.

პირველი ტოპოლოგიური ინდექსი შემუშავებულია 1947 წელს ვინერის მიერ. ვინერის ინდექსი - $W(G)$ წარმოადგენს რიცხვს, რომელიც ალკანს ნახშირბადოვანი ჩონჩხის აღმწერ G - ქიმიურ გრაფაში ყველა წვეროთა წყვილებს შორის არსებული მანძილის (ქიმიური ბმების) ჯამის ტოლია. ვინერის ინდექსი გამოითვლება ფორმულით:

$$W(G) = \sum_{i=1}^h i N_i \quad (10)$$

სადაც: $N_i - i$ მანძილით დაშორებული წვეროთა წყვილების რიცხვია. ქვემოთ სქემაზე განხილული $W(G)$ გამოთვლა 6, ბუტანისათვის.



$$\begin{aligned} N_1 &= 3 \\ N_2 &= 2 \\ N_3 &= 1 \end{aligned} \tag{11}$$

$$\sum_{i=1}^h iN_i = 1 \times 3 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 1 = 10$$

ვინერის ინდექსი საფუძვლად დაედო ალკანების დულიელის ტემპერატურას, წარმოქმნის სითბოს, მოლური მოცულობისა და მოლეკულური რეფრაქციის გამოთვლის ფორმულებს.

დღეისათვის არსებობს დაახლოებით ექვსი ათეული ტოპოლოგიური ინდექსი, რომელთაგან 7 შემუშავებულია მათემატიკური ქიმიის ქართული სკოლის მიერ. მათგან, განსაკუთრებით ფართოდ აპრობირებულია ოთხი: $lg(\Delta_{ანბ})$, $lg(\Delta_{ქანბ})$, $lg(\Delta_{ჯანბ})$, $lg(\Delta_{გპ})$.

დაწერილებით განვიხილოთ ამ ინდექსების აგების პრინციპები.

$lg(\Delta_{ანბ})$ - ტოპოლოგიური ინდექსი წარმოადგენს ანბ-მატრიცის (აბრევიატურა „ანბ“ ნიშნავს ატომური ნომერი ბმა). დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობით ლოგარითმს. ანბ - მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია მნიშვნელობის ათობით ლოგარითმს. ანბ - მატრიცის დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია - ქიმიური ბმების ჯერადობები. სამატომიანი ABC მოლეკულის შესაბამისი ანქ - მატრიცა:

$$\begin{vmatrix} Z_A & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB} & Z_B & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC} & \Delta_{BC} & Z_C \end{vmatrix} \tag{12}$$

სადაც: Z_A, Z_B , და Z_C , შესაბამისად A, B, და C ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრებია; Δ_{AB}, Δ_{BC} და Δ_{AC} - ქიმიურ ბმათა ჯერადობები A და B, B და C, A და C ატომებს

შორის. ანზ - მატრიცების მეთოდის ფარგლებში შესწავლილი 5 ათეულ ქიმიურ სისტემებზე მეტი (ორგანულ ნაერთთა სხვადასხვა ჰომოლოგიური რიგები, ერთტიპური არაორგანული და კოორდინაციული ნარეგების კლასები).

$ly(\Delta\text{ქანზ})$ – ტოპოლოგიური ინდექსი წარმოადგენს ქანზ –(ქვაზი -ანზ) მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათობით ლოგარითმს. ქანზ - მატრიცის ფორმა იგივეა რაც ანზ - მატრიცა. სხვაობა იმაში მდგომარეობს, რომ დიაგონალური ელემენტები წარმოადგენენ არა ცალკეული ელემენტების ატომურ ნომრებს, არამედ მოლეკულის ცალკეულ სტრუქტურულ ფრაგმენტში შემავალ ქიმიურ ელემენტებს ატომური ნომრების ჯამს, ამგვარად:

$$\begin{aligned} Z_A &= \sum Z_a \\ Z_B &= \sum Z_b \\ Z_C &= \sum Z_c \end{aligned} \tag{13}$$

არადიაგონალური ელემენტები წარმოადგენენ ქიმიური ბმების ჯერადობას ამ სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის. ამგვარი, ქანზ-მატრიცა იგება არა უშუალოდ მოლეკულის, არამედ მისი სტრუქტურული მოდელის ბმაზე, რაც ნოვატორული მიდგომაა მათემატიკურ ქიმიაში.

ქანზ - მატრიცის მეთოდის ფარგლებში შესწავლილია ოთხი ათეული ქიმიური სისტემა.

$lg(\Delta\text{ჯანზ})$ - ტოპოლოგიური ინდექსი წარმოადგენს ჯანზ (ჯგუფური ანზ) მატრიცის დეტერმინანტს მნიშვნელობის ათობით ლოგარითმს.

ჯანზ-მატრიცა შემუშავებულია AB_n კლასის მოლეკულებისათვის, სადაც $A - n$ ვალენტოვანი ელემენტია, $B -$ ერთვალენტოვანი. ჯანზ - მატრიცა მეორე რანგისაა. პირველი დიაგონალური ელემენტი A ქიმიური ელემენტის ატომური ნომერია, მეორე- B ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრების ჯამია. (ამგვარად) n რაოდენობა ერთვალენტოვანი B ელემენტი განიხილება ერთ ქვაზიელემენტად არადიაგონალური ელემენტებია n (ამგვარად n რაოდენობა ერთმაგი ქიმიური ბმა განიხილება როგორც ერთი n ჯერობის ქვაზი-ბმა). ამგვარ, ჯანზ-მატრიცის ზოგადი სახეა:

$$\left\| \begin{array}{c} Z_A & n \\ n & nZB \end{array} \right\| \tag{14}$$

$lg(\Delta_{\text{გპ}})$ - ტოპოლოგიური ინდექსი წარმოადგენს ეპ - მატრიცის დეტერმინანტის მნიშვნელობის ათეულ ლოგარითმს. ეპ - მატრიცის (აბრევიატურა ნიშნავს ელექტროუარყოფითობა - პოლარობა) დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ელექტროუარყოფითობები, არადიაგონალური - შესაბამის ქიმიური ბმების პოლარობა. სამატომიანი ABC მოლეკულისათვის ეპ - მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} X_{AA} & \mu_{AB} & \mu_{AC} \\ \mu_{AB} & X_B & \mu_{BC} \\ \mu_{AC} & \mu_{BC} & X_C \end{vmatrix} \quad (15)$$

სადაც: X_A, X_B, X_C -A, B და C ქიმიური ელემენტების ელექტროუარყოფითებია; $\mu_{AB}, \mu_{AC}, \mu_{BC}$ - $A \sim B, A \sim C$ და $B \sim C$ ქიმიური ბმების პოლირობა.

ამგვარად, იგება კორელაციური განტოლებები:

$$P = a_1 lg(\Delta_{\text{ანბ}}) + b_1 \quad (16)$$

$$P = a_2 lg(\Delta_{\text{ქანბ}}) + b_2 \quad (17)$$

$$P = a_3 lg(\Delta_{\text{ჯანბ}}) + b_3 \quad (18)$$

$$P = a_4 lg(\Delta_{\text{გპ}}) + b_4 \quad (19)$$

სადაც: P მოლეკულის გარკვეული ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრია ($T_{\text{დუღ}}, T_{\text{დლ}}, d_4^{20}, \Delta G_f, \Delta H_f$ და სხვა); $a_1, a_2, a_3, a_4, b_1, b_2, b_3, b_4$ ნამდვილი რიცხვებია. კორელაციური განტოლებების აგება ხდება უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით.

კორელაციის სიზუსტე ხასიათდება ე.წ. კორელაციის კოეფიციენტით:

$$r = \sqrt{\frac{(\sum xy)^2}{\sum x^2 \sum y^2}} \quad (20)$$

ჯაფემ შემოიტანა კოლერაციის პირობითი კრიტერიუმი.

$r = 1$ იდეალური კორელაცია

$r > 0,99$ ბრწყინვალე კოლერაცია

$0,99 > r > 0,95$ დამაკმაყოფილებელი კოლერაცია

$0,95 > r > 0,90$ მიახლოებითი კორელაცია.

3. ტუტე-მეტალების ალუმინჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში [14]

ტუტე-მეტალების ალუმინჰიდრიდები მნიშვნელოვანი კლასის ნაერთებია. ისინი განსაკუთრებით საინტერესოა თეორიული თვალსაზრისით და ამ მიმართებით მათი კვლევა ინტენსიურად მიმდინარეობს.

ჩვენი მიზანი იყო ტუტე-ლითონების ალუმინჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. ტუტე მეტალების ალუმინჰიდრიდების ზოგადი ფორმულაა:



მათთვის შემუშავებულია მარტივი მოდელი



სადაც: $M = L, Na, K, Cs$; $x = [AlH_4]$.

აღნიშნული მოდელის შესაბამისი ქანბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\begin{vmatrix} Z_M & 1 \\ 1 & Z_x \end{vmatrix}$$

ცხრილში მოყვანილია $lg(\Delta_{ქანბ})$, d და S_{298}^0 ამ ნაერთებისათვის:

ცხრილი

$lg(\Delta_{ქანბ})$, d და S_{298}^0 ტუტე-ლითონების ალუმინჰიდრიდებისათვის:

$M[AlH_4]$	$lg(\Delta_{ქანბ})$,	$d, გ/სმ^3$	S_{298}^0 (ჯ /მოლი K)
$L[AlH_4]$	1,70	0,92	78,7
$Na[AlH_4]$	2,27	1,28	127,9
$K[AlH_4]$	2,51	1,33	129,0
$C_3[AlH_4]$	2,97	2,84	150,8

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, კომპიუტერით ავაგეთ ორი კორელაციური განტოლება:

$$d = 0,41 \lg(\Delta_{\text{ქანბ}}) + 0,33 \quad (24)$$

$$S_{298}^0 = 21,2 \lg(\Delta_{\text{ქანბ}}) + 76,8 \quad (25)$$

გამოთვლებმა აჩვენა, რომ კორელაციის კოეფიციენტი, შესაბამისად ტოლია: 0,980; 0,984; ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. გ. გამზიანი მათემატიკური ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, „მეცნიერება“, 1990.
2. გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი. იზომერიის მოვლენა მათემატიკური ქიმიის თვალთახედვით. თბილისი, „მეცნიერება“, 1992.
3. Яцимирский К. Б. Применение теории графов в химии. Киев, Наука и думка, 1973г.
4. T. Rouvry chemical Application of Topology and Group Theory / Ed. A. Balaban, Amsterdam, Els. su. public, 1983.
5. გ. ლევიშვილი, ლ. ასათიანი, მოლეკულური დესკრიპტორები ელემენტორგანულ ნაერთთა ქიმიაში. თბილისი, თსუ გამომც. 1998 წ.
6. მ. გვერდწითელი ფიზიკურ-ორგანული ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი თსუ გამომცემა; 1982.
7. გ. გამზიანი, ნ. კობახიძე, მ. გვერდწითელი. ზოგი რამ ტოპოლოგიური ინდექსების შესახებ. თბილისი, თსუ გამოცემა. 1995.
8. გ. გამზიანი, მ. გვერდწითელი, გრაფები, მატრიცები, დეტერმინანტები და მათი გამოყენება ქიმიაში. თბილისი, თსუ. გამოცემა. 1996.
9. M. Gverdwteli, G.Gamziani, I. Gverdwteli. The contingent Marces of Graph and thovi Modipication. Tbilisi, TV-pre10 1995.
10. K. Kupatadze, T. lobzhanidze, M. Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of some Organic Molecules and their Transformation. Tbilisi, “Universal”, 2007.
11. M. Gverdwteli, M. Rusia, G. Chachava. Mathematical-chemical Investigation of some Classes of Inorganic and Organic Compounds. Tbilisi, “Universal”, 2010.
12. M. Gverdwteli, M. Rusia, K. Kupatadze. Mathematical-chemical Investigation of some Inorganic Halides. Tbilisi, , “Universal”, 2010.
13. გ. ქვარცხავა, მ. გვერდწითელი: ზოგიერთი არაორგანული და ორგანული ნაერთის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა. თბილისი, „ტექნიკური უნივერსიტეტი“. 2018

14. მ. გვერდწითელი, თ. ლობჯანიძე, ქ. გიორგაძე, თ. რობაქიძე. ტუტემეტალების ალუმინჰიდრატების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა „საქართველო საინჟინრო სიახლენი“; 2018. 4(88) გვ.66