

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია

CHEMICAL SERIES

СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

	ტომი	
2013 № 3 – 4	Volume	39
	Том	

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია

CHEMICAL SERIES

СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

	ტომი	
2013 № 3 – 4	Volume	39
	Том	

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია
CHEMICAL SERIES
СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

ტომი

Volume **39 № 3 – 4**

Том

ჟურნალი დაარსდა 1975 წელს
The Journal is founded in 1975
Журнал основан в 1975 году

წელიწადში 4 ნომერი
4 numbers annually
4 номера в год

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

2013

სარედაქციო კოლეგია

თ.ანდრონიკაშვილი, ი.ჟორდანია, ი.რუჟილო (პოლონეთი), შ.სამსონია, ე.ქემერტელიძე, გ.ცინცაძე, ვ.ციციშვილი (რედაქტორი), კ.ჯაფარიძე, თ.აგლაძე, ა.ბაკურიძე, ზ.ფაჩულია

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემია, ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების განყოფილება
თბილისი, რუსთაველის გამზირი 52
პასუხისმგებელი მდივანი რ.ცისკარიშვილი, მდივანი ქებრალიძე
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი
0186 თბილისი, პოლიტკოვსკაიას ქ. № 5; ტელ. 254-15-62; ელ.ფოსტა: chematsne@posta.ge
ჟურნალის ელექტრონული ვერსია (ტომი 33, № 1-დან) იხილეთ ვებ-გვერდზე: www.ipoc.org.ge
სტატიების რეფერატებს აქვეყნებს Chemical Abstracts* და საქართველოს რეფერატული ჟურნალი**

EDITORIAL BOARD

T.Andronikashvili, K.Japaridze, E.Kemertelidze, I.Jordania, Jan K.Rózylo (Poland),
Sh.Samsoniya, G.Tsintsadze, V.Tsitsishvili (Editor), T.Agladze, A.Bakuridze, Z.Pachulia

Georgian National Academy of Sciences, Department of Chemistry and Chemical Technologies
52 Rustaveli av., Tbilisi
Executive Secretary R.Tsiskarishvili, K.Ebralidze
Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
5 Politkovskaia str., Tbilisi 0186; tel.: 254-15-62; e-mail: chematsne@posta.ge
Digital version of Proceedings (from volume 33, No 1) see at web-site www.ipoc.org.ge
Abstracts of articles are published in Chemical Abstracts* and Georgian Abstracts Journal**.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Т.Г.Андроникашвили, К.Г.Джапаридзе, И.С.Жордания, Э.П.Кемертелидзе, Я.К.Ружи́ло
(Польша), Ш.А.Самсония, Г.В.Цинцадзе, В.Г.Цицишвили (редактор), Т.Р.Агладзе,
А.Дж.Бакуридзе, З.В.Пачулия

Национальная Академия наук Грузии, Отделение химии и химических технологий
Тбилиси, проспект Руставели 52
Ответственный секретарь Р.П.Цискаришвили, секретарь К.Г.Эбралидзе
Институт физической и органической химии им. П.Г.Меликишвили
0186 Тбилиси, ул. А.Политковской 5; тел. 254-15-62; эл.почта: chematsne@posta.ge
Электронную версию журнала (начиная с тома 33, № 1) смотрите на веб-сайте www.ipoc.org.ge
Резюме статей публикуются в Chemical Abstracts* и Грузинском реферативном журнале **

* 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210-0012, USA, American Chemical Society
** LERL TECHINFORMI, <http://www.tech.org.ge>; www.tech.caucasus.net

შინაარსი

ანალიზური ქიმია

ლ.ლურჯუმელია, ვ.ტყემალაძე, ს.ტყემალაძე, მ.ვაიერმანი. მანგანუმის დაბალხარისხოვანი მადნებისა და შლამების გამდიდრება შშრალი მეთოდით 139

არატრბანული ქიმია

ი.დიდბარაძე, ნ.ლექიშვილი, მ.რუსია, ხ.ბარბაქაძე, ზ.ფაჩულია. დარიშხანშემცველი წარმოების ნარჩენები, როგორც მატერიალური რესურსი ახალი ნაერთების მისაღებად 143

ნ.ლექიშვილი, მ.რუსია, ზ.ფაჩულია, ხ.ბარბაქაძე, ქ.კოკია, ქ.კიორვაძე, მ.ცინცაძე. ზოგიერთი აზოტშემცველი დიფუნქციური ლიგანდის d-მეტალებთან კომპლექსწარმოქმნის უნარის და ბიოაქტიურობის თეორიული გამოკვლევა 150

ელემენტოქიმია

მ.ხუციშვილი, ს.გასვიანი, ლ.ლაბაზაძე, ნ.მაისურაძე, ც.ვახიანი. ქრომის, მოლიბდენისა და სილიციუმის ერთდროული ელექტროქიმიური აღდგენის შესაძლებლობის დადგენა იონური ნალღობიდან 156

გ.ცაგარელი, შ.მახათაძე, ნ.მაისურაძე, ლ.ბაცანაძე, ა.შაქარიშვილი. რკინით მოდიფიცირებული მანგანუმის დიოქსიდის ფირები სუპერკონდენსატორებისათვის* 161

ორბანული ქიმია

ნ.ჩაგანავა, მ.ციცავი, მ.ხაჩიძე, მ.ჩხაიძე, მ.ბუზარიაშვილი. 4-ჰიდროქსიკუმარინისა და ქინოლინის ბირთვების შემცველი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების სინთეზი სამკომპონენტური რეაქციით 162

შიზიკური ქიმია

ე.ცხაკია, რ.ხოსიტაშვილი. მეთანის აღსორბციის შესწავლა ბუნებრივ მოდიფიცირებულ ცეოლითებზე 165

რ.თუშურაშვილი, მ.ფანჩიძე, გ.შანიძე, მ.მამარდაშვილი, ნ.კვიციანი. ზოგიერთი რადიოპროტექტორის გაგენის შესწავლა სხვადასხვა ორგანული საღებრის მედეგობის გაზრდის მიზნით გამაგამოსხივების ველში 167

მ.ზაქარაია. შორ მანძილებზე მუხტის გადატანაზე კონდენსირებული გარემოსა და ელექტრონული გაცვლითი ინტეგრალის ერთობლივი ზემოქმედების თეორიული შესწავლა* 170

ა.სარუნანიშვილი, დ.ბიბილაშვილი, ნ.ანდლუაძე, ქ.კობიაშვილი. თერმული დამუშავებისას Na_2CO_3 - BaCO_3 - H_3BO_3 - SiO_2 სისტემის რიგი კომპოზიციის ქცევის თერმოდინამიკური და პეტროქიმიური შეფასება* 173

მათემატიკური ქიმია

გ.გ.ჩაჩავა, მ.რუსია, ლ.ლობჯანიძე, მ.გვერდწითელი. დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა 178

ნ.კუპატაძე, მ.გვერდწითელი. ზოგიერთი d-მეტალის ჰიდრიდის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში 180

ქ.კუპატაძე, მ.რუსია, მ.გვერდწითელი. დარიშხანის (III) ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა* 183

მაღალმოლეკულურ ნაერთთა ქიმია

გ.პაპავა, ვ.შეროზია, ნ.დოხოტურიშვილი, ი.ჩიტერეკაშვილი, მ.გურგენიშვილი, რ.ცისკარიშვილი, შ.პაპავა, რ.ლიპარტელიანი, ნ.ხოტენაშვილი. ქიმიური მეთოდით გრაფიტის ფუნქციონის სპილენძით პლაკირების პროცესის შესწავლა 184

* რეზიუმე

გ.პაპავა, ნ.გელაშვილი, ევაგაშვილიძე, ნ.მაისურაძე, ნ.დონტურიშვილი, ზ.თაბუკაშვილი, ნ.მაისურაძე. 189
 ნოვოლაქის ტიპის პოლიმერული კომპოზიციები და პლასტიკური მასალები მათ
 საფუძველზე

ლ.ჯანაიაშვილი, განდრონიკაშვილი, ა.ვარადაშვილი. 194
 α,ω-ბის(ამინოდიმეთილსილილ)ტეტრამეთილ-
 ციკლოდისილაზანის ჰეტეროფუნქციური კონდენსაცია ტერეფტალის მჟავას დიქლორ-
 ანჰიდრიდთან და α,ω-ბის (β-კარბოქსიეთილ)დიმეთილსილოქსანებთან*

კოორდინაციულ ნაერთთა ქიმია

მ.ცინცაძე, ა.ამბულაშვილი, რ.კლდიაშვილი, ე.თოფურია, თ.ტუსიაშვილი, თ.ცინცაძე. 195
 ჰექსამეთილენ-
 ტეტრამინთან (ჰმტა) ლითონთა კოორდინაციული ნაერთები

ი.დიდბარიძე, მ.რუსია, მ.კიკალიშვილი, კ.რუხაია, რ.გიგაური. 199
 კობალტისა (II) და ნიკელის (II) ერთმა-
 ნეთისაგან დაცილება წყალხსნარებში

მ.ცინცაძე, დ.ლორთქიფანი, გ.ცინცაძე, ნ.გვეგვიძე, ი.გველესიანი, ლ.გოლოძე. 210
 გამხსნელის გავლენა 2,8-
 დიეთილ-2,4,6,8-ტეტრააზაბიციკლო[3,3,0]-ოქტანდიონ-3,7 კომპლექსწარმოქმნის უნარზე*

შარმაპოქიმია

თ.ცინცაძე, თ.სალარეიშვილი, ი.გველესიანი, დ.გულბანი, ხ.წიქარიშვილი. 211
 ინფორმაცია საქართველოს
 ფარმაცევტულ ბაზარზე არსებული ანტიდიაბეტური პრეპარატების შესახებ

თ.სალარეიშვილი, ი.გველესიანი, დ.გულბანი, დ.დუღუნიშვილი. 215
 საქართველოში მოზარდი ბალის ქონდრის
 ფოთლების (*Satureja hortensis* L.) ამინომჟავების შედგენილობა

აბრარული ქიმია

ნ.მდივანი, რ.მდივანი, ნ.ზარნაძე, ვ.წერეთელი. 217
 სათესლე კარტოფილის წარმოება პერლიტის შემცველ
 სუბსტრატზე

ბარემოს ქიმია

ნ.ბოკუჩავა, დ.ჯინჭარაძე, ბ.გოგიჩაიშვილი. 221
 კილა-კუპრას ფსევდოვულკანური ტალახების ქიმიური და
 ფიზიკურ-ქიმიური მაჩვენებლები

ო.რჩეულიშვილი, ა.რჩეულიშვილი, ნ.რჩეულიშვილი, მ.ოსეფაშვილი, დ.პაპუკაშვილი, ლ.ტულუში, 226
ნ.მეტრეველი. ზაფრანაში კადმიუმის დაგროვების და განაწილების შესწავლა

დ.ჯინჭარაძე, ნ.ბოკუჩავა, ბ.გოგიჩაიშვილი. 233
 ადგილობრივი თიხოვანი მასალები კოსმეტიკურ
 პროდუქტებში*

ქიმიური ეკოლოგია

ნ.ნონიკაშვილი, ნ.ქავთარაძე, ი.მიქაძე, თ.უჩანეიშვილი, ა.დოლიძე. 234
 α-პინენისა და მისი ნაწარმების
 სინთეზის შესახებ

ი.მიქაძე, ნ.ბარბაქაძე, თ.დვებუაძე, მ.ჯაფარიძე, ქ.ქორიაშვილი. 237
 საქართველოში გაუვარავისებული
 პესტიციდების მარაგების გაუვნებელოფისა და დაბინძურებული ნიადაგების აღდგენის
 შესაძლო მეთოდები

ქიმიური ტექნოლოგია

მ.ყიფიანი, ზ.ოქროსცვარიძე. 240
 Ti-Si სისტემის კონგლომერირებული ფხვნილებიდან მიღებული
 აირთერმული დანაფარების ადგილობრივი სიმტკიცისა და მიკროსისალის კვლევა

მ.ტყემალაძე, ე.შაფაქიძე. 243
 დავით გარეჯის ბარიტ-პოლიმეტალური საბადოს გადამხურავი ქანები –
 არატრადიციული ნელლეული მინის და ცემენტის ადგილობრივი წარმოებისათვის

მ.ქარქაშაძე, ნ.ლომთაძე, ჟ.რევიშვილი, ლ.შანიძე. 248
 წებოს კომპოზიცია ეთილენისა და ვინილაცეტატის
 თანაპოლიმერის ბაზაზე ნანოტექნოლოგიების გამოყენებით

ნ.მაისურაძე, ნ.დონტურიშვილი, ნ.გელაშვილი, ევაგაშვილიძე, შ.პაპავა, ვ.შეროზია, გ.პაპავა, 253
რ.ლიპარტელიანი, ნ.ხოტენაშვილი. რეზოლური ოლიგომერის შემცველი პოლიმერული
 კომპოზიციების გადამუშავების ოპტიმალური პირობების დადგენა ფაქტორული
 ექსპერიმენტის გზით

ლ.ვაბრიჭიძე, ე.ხუციშვილი, ნ.ქობულაშვილი, ნ.ხუციშვილი, თ.გივიტაშვილი, რ.ხარატი, გ.ურუშაძე, 257
ნ.კეკელიძე. რაფინირებული სილიციუმის მასალის გადადნობის მეთოდით მიღება

<i>მციცავი, მჩხაიძე, მ.ხაჩიძე, მბუზარიაშვილი, ქებრალიძე, ვციციშვილი.</i> მცენარეული ნედლეულიდან სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქციის პრაქტიკული ასპექტები	260
<i>ვციციშვილი, ნ.დოლაბერიძე, ნ.მირძველი, მ.ნიჟარაძე.</i> თეთრი ფერის ცვლითური შემავსებლის მიღება შემფუთავი ქაღალდის წარმოებისთვის	265
<i>მ.ქარქაშაძე, ნ.ლომაძე.</i> ოქსიდიქლორტრიანიზინით ტყავის დათრიმულა	269
<i>ვ.ღარიბაშვილი, ვ.მეტრეველი, ე.გოზალიშვილი, ზ.მირიჯანაშვილი, ა.კანდელაკი.</i> დურალუმინის ანოდური ოქსიდირება და გაშავება	271
<i>ნ.ადოლიძე.</i> ულტრაბერითი შედუღების მეთოდის გამოყენების შესაძლებლობების კვლევა ხელოვნური ბეწვის ტანსაცმლის დამზადების დროს*	277
<i>მ.დათუაშვილი.</i> ტანსაცმლის დეტალთა ფორმირების მეთოდების სრულყოფა პოლიეთერ-იზოციანატური კომპოზიტებისაგან*	280
<i>გ.ცაგარელი, ნ.მაისურაძე, ლ.ბაცანაძე, ა.შაქარიშვილი, შ.მასხათაძე.</i> საქაროზის თანაობისას მანგანუმის დიოქსიდის ფხვნილის მიღების ელექტროქიმიური მეთოდი*	282
მისალროცი – ბ.ცინცაძე	283
ბახსენება – ბ.ზვიაღაძე	286
ბახსენება – კ.ჯაფარიძე	288
ინფორმაცია ავტორებისათვის	291

CONTENTS

<u>ANALITICAL CHEMISTRY</u>	
<i>L.Gurchumelia, V.Tkemaladze, S.Tkemaladze, M.Wireman.</i> Enrichment of Low-Quality Manganese Ores and Slimes by Means of Dry Enrichment Method*	142
<u>ANORGANIC CHEMISTRY</u>	
<i>I.Didbaridze, N.Lekishvili, M.Rusia, K.Barbakadze, Z.Pachulia.</i> Arsenic-Containing Industrial Waste as the Material Resource for Obtaining of a New Compounds*	149
<i>N.Lekishvili, M.Rusia, Z.Pachulia, K.Barbakadze, K.Kokaia, K.Giorgadze, M.Tsintsadze.</i> Study of Complex Forming Ability and of Theoretical Bioactivity of Some Nitrogen-Containing Difunctional Ligands With d-Metals*	155
<u>ELECTROCHEMISTRY</u>	
<i>M.Khutsishvili, S.Gasviani, L.Abazadze, N.Maisuradze, T.Gabisonia.</i> Establishment of Possibility of Electrochemical Repairs of Chromium, Molybdenum, and Silicon from Their Ionic Melts at Joint Presence*	158
<i>G.Tsagareli, Sh.Makhatadze, N.Maisuradze, L.Batsanadze, A.Shacarishvili.</i> Anodic Films of Iron-Modified Manganese Dioxide for Super Condensers*	161
<u>ORGANIC CHEMISTRY</u>	
<i>N.Chaganava, M.Tsitsagi, M.Khachidze, M.Chkhaidze, M.Buzariashvili.</i> Synthesis of Biologically Active Compounds Containing 4-Hydroxycoumarin and Quinolin by Three-Component Reaction*	164
<u>PHYSICAL CHEMISTRY</u>	
<i>E.Tskhakaia, R.Khositashvili.</i> Study of Methane Adsorption on Natural Modified Zeolites*	166
<i>R.Tushurashvili, M.Panchvidze, G.Shanidze, M.Mamardashvili, N.Kvirkvelia.</i> Study of the Effect of Some Radioprotectors for Increase Stability of Various Dyes in the Field of Gamma-Radiation*	169
<i>M.Zakaraya.</i> Theoretical Study of the Simultaneous Influence of Condensed Media and Electronic Exchange Integral on a Long-Range Charge Transfer Processes	170
<i>A.Sarukhanishvili, D.Bibileishvili, N.Andguladze, K.Kobiashvili.</i> Thermodynamic and Petrochemical Estimation of Behavior Some Composition of the Na ₂ CO ₃ -BaCO ₃ -H ₃ BO ₃ -SiO ₂ Sistem*	177
<u>MATHEMATICAL CHEMISTRY</u>	
<i>G.Chachava, M.Rusia, L.Lobdjanidze, M.Gverdtsiteli.</i> Mathematical-Chemical Investigation of the Hydrides of the Elements of Arsenic Subgroup*	179
<i>N.Kupatadze, M.Gverdtsiteli.</i> Mathematical-Chemical Investigation of the Hydrides of Some d-Metals within the Scope of ANB-Matrices Method*	181
<i>K.Kupatadze, M.Rusia, M.Gverdtsiteli.</i> Mathematical-Chemical Investigation of Arsenic (III) Halides within the Scope of ANB-Matrices Method	182
<u>CHEMISTRY OF MACROMOLECULAR COMPOUNDS</u>	
<i>G.Papava, V.Sherozia, N.Dokhturashvili, I.Chitrekashvili, M.Gurgenishvili, R.Tsiskarishvili, Sh.Papava, R.Liparteliani, N.Khotenashvili.</i> Investigation of Cladding Process of Graphite Powder with Copper by Chemical Method*	188
<i>G.Papava, N.Gelashvili, E.Gavashelidze, N.Maisuradze, N.Dokhturashvili, Z.Tabukashvili, N.Maisuradze.</i> Novolak Type Polimer Compositions*	191
<i>L.Janiashvili, G.Andronikashvili, A.Varadashvili.</i> Heterofunctional Condensation of α,ω -Bis(amino-dimethylsilyl)tetramethylcyclodisilazanes with Dichloranhydride Tereftalic Acids and α,ω -Bis(β -carboxyethyl)dimethylsiloxanes*	194
<u>CHEMISTRY OF COORDINATION COMPOUNDS</u>	
<i>M.Tsintsadze, A.Mamulasvili, R.Kldiashvili, E.Topuria, T.Tusiashvili, T.Tsintsadze.</i> Coordinational Compounds of Metals with Hexamethylenetetramine (HMTA)*	198

* Summary

<i>I.Didbaridze, M.Rusia, M.Kikalishvili, K.Rukhaia, R.Gigauri.</i> Separation of Nickel (II) from Cobalt (II) in Aqueous Solutions *	202
<i>M.Tsintsadze, D.Lochoshvili, G.Tsintsadze, N.Gegeshidze, I.Gvelesiani, L.Golodze.</i> Solvent Effect on Complex Formation Ability of 2,8-Diethyl-2,4,6,8-tetraazabicyclo[3,3,0]-octandion-3,7 with Metals*	210
PHARMACOCHEMISTRY	
<i>T.Tsintsadze, T.Sagareishvili, I.Gvelesiani, D.Gulbani, K.Tsikarishvili.</i> Information on Anti-Diabetic Drugs at Georgian Pharmaceutical Market*	214
<i>T.Sagareishvili, I.Gvelesiani, D.Gulbani, D.Ghughunishvili.</i> Composition of Amino Acids of Leaves <i>Satureja hortensis</i> L. Grown in Georgia*	216
AGRARIAN CHEMISTRY	
<i>N.Mdivani, R.Mdivani, N.Zarnadze, V.Tsereteli.</i> Production of Seed Potato on the Perlite-Based Substrate*	220
ENVIRONMENTAL CHEMISTRY	
<i>N.Bokuchava, D.Jincharadze, B.Gogichaishvili.</i> Chemical and Physico-Chemical Parameters of Kila-Kupra Pseudo-Volcanic Muds*	225
<i>O.Rcheulishvili, A.Rcheulishvili, H.Rcheulishvili, M.Osefashvili, D.Papukashvili, L.Tugushi, N.Metreveli.</i> Study of Cadmium Distribution and Accumulation in Saffron *	228
<i>D.Jincharadze, N.Bokuchava, B.Gogichaishvili.</i> Local Clay Materials in Cosmetics Products*	233
CHEMICAL ECOLOGY	
<i>N.Nonikashvili, N.Kavtaradze, I.Mikadze, T.Uchaneishvili, A.Dolidze.</i> About Synthesis of α -Pinene and its Derivatives*	236
<i>I.Mikadze, N.Barbakadze, T.Dgebuadze, M.Japaridze, K.Kochiashvili.</i> Possible Methods of Neutralization of Pesticide Stocks and Remediation of Contaminated Soils in Georgia*	239
CHEMICAL TECHNOLOGY	
<i>M.Kipiani, Z.Oqrostsvavidze.</i> Investigation of Adhesion Solidity and Micro-Hardness of Gas-Thermal Coating Obtained from Ti-Si System Conglomerated Powders*	242
<i>M.Tkemeladze, E.Shapakidze.</i> Cap Rocks of Barite-Polymetallic Deposit of David-Garedji – Non-Traditional Raw Material in Local Industry of Glass And Cement*	247
<i>M.Karkashadze, N.Lomtadze, Zh.Revishvili, L.Shanidze.</i> Glue Composition on the Basis of Ethylene and Vinyl-Acetic Ester Copolymers with Nanotechnology Use*	252
<i>N.Maisuradze, N.Dokhturishvili, N.Gelashvili, E.Gavashelidze, Sh.Papava, V.Sherosia, G.Papava, R.Liparteliani, N.Khotenashvili.</i> Determination of Optimal Conditions for Processing of Pesol Olygomer Containing Polymer Compositions by Factorial Experiment*	255
<i>L.Gabrichidze, E.Khutsishvili, N.Kobulashvili, N.Khutsishvili, T.Gigitashvili, R.Kharati, G.Urushadze, N.Kekelidze.</i> Obtaining of Refined Silicon by Remelting Method*	259
<i>M.Tsitsagi, M.Chkhaidze, M.Khachidze, M.Buzariashvili, K.Ebraldize, V.Tsitsishvili.</i> Practical Aspects of Supercritical Fluid Extraction from Plant Raw Material*	264
<i>V.Tsitsishvili, N. Dolaberidze, N.Mirdzveli, M.Nijaradze.</i> Preparation of White Zeolite Filler for Paper Production*	268
<i>M.I.Karkashadze, N.Z.Lomtadze.</i> Tanning of Skin by Oxydichlorotriazine*	270
<i>V.Garibashvili, V.Metreveli, E.Gozalishvili, Z.Mirijanashvili, A.Kandelaki.</i> Anodic Oxidation and Blackening of Duralumin*	274
<i>N.A.Dolidze.</i> Of the Study of Ultrasonic Welding with Faux for Clothing Manufacturers*	277
<i>M.Datuashvili.</i> Improvement of Molding Method for Clothes Polyester-Izocianate Composites*	280
<i>G.Tsagareli, N.Maisuradze, L.Batsanadze, A.Shacarishvili, Sh.Makhatadze.</i> Electrochemical Method of Preparation of Manganese Dioxide Powder at Presence of Saccharose*	282
CONGRATULATION – G.Tsintsadze	285
IN MEMORY – G.Zviadadze	287
IN MEMORY – K.Japaridze	290
INFORMATION for AUTHORS	291

* Summary

СОДЕРЖАНИЕ

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Л.В.Гурчумелия, В.С.Ткемаладзе, С.В.Ткемаладзе, М.Н.Вайерман.* Обогащение 142
низкокачественных марганцевых руд и шламов сухим методом*

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- И.С.Дидбаридзе, Н.Г.Лекишвили, М.Ш.Русия, Х.А.Барбакадзе, З.Г.Пачулия.* Мышьяксодержащие 149
промышленные отходы как материальный ресурс для получения новых соединений*
- Н.Г.Лекишвили, М.Ш.Русия, З.В.Пачулия, Х.А.Барбакадзе, К.Т.Кокая, К.П.Гиоргадзе, М.Г.Цинцадзе.* Изучение способности комплексообразования и виртуальной 155
биологической активности некоторых азотсодержащих дифункциональных лигандов с d-металлами*

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

- М.Ш.Хуцишвили, С.Г.Гасвиани, Л.М.Абазадзе, Н.Г.Маисурадзе, Ц.Д.Габисония.* Установление 158
возможности совместного электрохимического восстановления хрома, молибдена и кремния из ионных расплавов*
- Г.А.Цагарели, Ш.М.Махатадзе, Н.Г.Майсурадзе, Л.Г.Бацанадзе, А.Г.Шакаришвили.* Анодные 159
плёнки модифицированного железом диоксида марганца для суперконденсаторов

ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Н.Т.Чаганова, М.В.Цицаги, М.М.Хачидзе, М.Ш.Чахидзе, М.С.Бузаришвили.* Синтез 164
содержащих 4-гидроксикумариновые и хинолиновые циклы биологически активных соединений трехкомпонентной реакцией*

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Е.Цхакаиа, Р.Хоситашвили.* Исследование адсорбции метана на природных модифицированных 166
цеолитах*
- Р.Г.Тушурашвили, М.В.Панчвидзе, Г.В.Шанидзе, М.И.Мамардашвили, Н.М.Квирквелия.* 169
Изучение влияния некоторых радиопротекторов с целью повышения стойкости различных органических красителей в поле гамма-излучения*
- М.Г.Закарая.* Теоретическое изучение совместного влияния конденсированной среды и 172
электронного обменного интеграла на процессы переноса заряда на больших расстояниях*
- А.В.Саруханишвили, Д.П.Бибилеишвили, Н.Ш.Андгуладзе, К.З.Кобиашвили.* Термодинамическая 173
и петрохимическая оценка поведения ряда композиций системы $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$ при термической обработке

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Г.Н.Чачава, М.Ш.Русия, Л.В.Лобжанидзе, М.И.Гвердцители.* Математико-химическое 179
исследование гидридов элементов подгруппы мышьяка*
- Н.О.Купатадзе, М.И.Гвердцители.* Математико-химическое исследование некоторых d-металлов 181
в рамках метода АНП-матриц*
- К.Т.Купатадзе, М.Ш.Русия, М.И.Гвердцители.* Математико-химическое исследование 183
галогенидов мышьяка (III) в рамках метода АНС-матриц*

ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

- Г.Ш.Папава, В.А.Шерозиа, Н.С.Дохтуришвили, И.А.Читрекашвили, М.Б.Гургенишвили, Р.П.Цискаришвили, Ш.Р.Папава, Р.Г.Липартелиани, Н.З.Хотенашвили.* Изучение 188
процесса плакирования медью порошка графита химическим методом*
- Г.Ш.Папава, Н.С.Гелашвили, Э.Ш.Гавашелидзе, Н.А.Маисурадзе, Н.С.Дохтуришвили, Н.А.Маисурадзе.* Полимерные композиции типа новолака и пластмассы на их основе* 191

* Резюме

- Л.К.Джаниашвили, Г.Г.Андроникашвили, А.Ш.Варадашвили.* Гетерофункциональная конденсация α,ω -бис(аминодиметилсилил)тетраметилциклодисилазанов с дихлорангидридом терефталевой кислоты и α,ω -бис(β -карбокситил)диметилсилоксанами 192
- ХИМИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ**
- М.Г.Цинцадзе, А.М.Мамулашвили, Р.Ш.Клдиашвили, Э.С.Топурия, Т.Н.Тусиашвили, Т.Г.Цинцадзе.* Координационные соединения металлов с гесаметилентетрамином (ГМТА)* 198
- И.Дидбаридзе, М.Русия, М.Кикалишвили, К.Рухая, Р.Гизаури.* Отделение кобальта (II) от никеля (II) в водных растворах* 202
- М.Г.Цинцадзе, Д.М.Лочошвили, Г.В.Цинцадзе, Н.Г.Гегешидзе, И.О.Гвелесиани, Л.Л.Голодзе.* Влияние растворителя на комплексообразующую способность 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7 203
- ФАРМАКОХИМИЯ**
- Т.Г.Цинцадзе, Т.Г.Сагареишвили, И.О.Гвелесиани, Д.В.Гулбани, Х.Дж.Цикаришвили.* Информация об антидиабетических препаратах на фармацевтическом рынке Грузии* 214
- Т.Г.Сагареишвили, И.О.Гвелесиани, Д.В.Гулбани, Д.М.Гугунишвили.* Аминокислотный состав листьев произрастающего в Грузии чабера садового (*Satureja hortensis* L.)* 216
- АГРОХИМИЯ**
- Н.М.Мдивани, Р.В.Мдивани, Н.К.Зарнадзе, В.С.Цертели.* Производство семенного картофеля на перлит-содержащем субстрате* 220
- ХИМИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ**
- Н.В.Бокучава, Д.Г.Джинчарадзе, Б.А.Гогичаишвили.* Химические и физико-химические показатели псевдовулканической грязи Кила-Купра* 225
- О.А.Рчеулишвили, А.Н.Рчеулишвили, Н.А.Рчеулишвили, М.Н.Осефашвили, Д.М.Папукашвили, Л.С.Тузуши, Н.О.Метревели.* Изучение распределения и аккумуляции кадмия шафраном* 228
- Д.Г.Джинчарадзе, Н.В.Бокучава, Б.А.Гогичаишвили.* Местные глинистые материалы в косметических продуктах 229
- ХИМИЧЕСКАЯ ЭКОЛОГИЯ**
- Н.У.Ноникашвили, Н.А.Кавтарадзе, И.И.Микадзе, Т.Г.Учанеишвили, А.В.Долидзе.* О синтезе α -пинена и его производных* 236
- И.И.Микадзе, Н.Г.Барбакадзе, Т.А.Дгебуадзе, М.З.Джапаридзе, К.Н.Кочиашвили.* Возможные методы переработки запасов непригодных пестицидов и восстановление загрязненных почв в Грузии* 239
- ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ**
- М.Кипиани, З.Окроецваридзе.* Исследование адгезионной прочности и микротвердости газотермических покрытия полученных из конгломерированных порошков Ti-Si системы* 242
- М.В.Ткемаладзе, Е.В.Шапакидзе.* Вскрышные породы барито-полиметаллической руды Давид-Гареджского месторождения – нетрадиционное сырье для местной стекольной и цементной промышленности* 247
- М.Каркашадзе, Н.Ломтадзе, Ж.Ревизишвили, Л.Шанидзе.* Клеевая композиция на базе сополимеров этилена и винилацетата с использованием нанотехнологии* 252
- Н.А.Маисурадзе, Н.С.Дохтуришвили, Н.С.Гелаишвили, Э.Ш.Гавашелидзе, Ш.Р.Папава, В.А.Шерозия, Г.Ш.Папава, Р.Г.Липартелиани, Н.З.Хотенашвили.* Установление оптимальных условий переработки содержащих резольный олигомер полимерных композиций путём факторного эксперимента* 256
- Л.Габричидзе, Э.Хуцишвили, Н.Кобулашвили, Н.Хуцишвили, Т.Гигиташвили, Р.Харати, Г.Урушадзе, Н.Кекелидзе.* Получение очищенного кремния методом переплавления* 259

* Резюме

<i>М.В.Цицаги, М.Ш.Чхаидзе, М.М.Хачидзе, М.С.Бузариашвили, К.Г.Ебралидзе, В.Г.Цицишвили.</i>	264
Практические аспекты экстракции суперкритическими флюидами из растительного сырья*	
<i>В.Г.Цицишвили, Н.М.Долаберидзе, Н.А.Мирдзвели, М.О.Нижарадзе.</i>	268
Получение белого цеолитного наполнителя для производства бумаги*	
<i>М.И.Каркашадзе, Н.З.Ломтадзе.</i>	270
Дублирование кож оксидихлортриaziном*	
<i>В.И.Гарибашвили, В.Ш.Метревели, Э.И.Гозалишвили, З.М.Мириджанашивили, А.З.Канделаки.</i>	274
Анодное оксидирование и чернение дуралюмина*	
<i>Н.А.Долидзе.</i>	275
Исследование возможности применения ультразвуковой сварки при изготовлении одежды из искусственного меха	
<i>М.В.Датуашвили.</i>	278
Усовершенствование метода формования деталей одежды из полиэфир-изоцианатных композитов	
<i>Г.А.Цагарели, Н.Г.Майсурадзе, Л.Г.Бацанадзе, А.Г.Шакаришвили, Ш.М.Махатадзе.</i>	281
Электрохимический метод получения порошков диоксида марганца в присутствии сахарозы	
ПОЗДРАВЛЕНИЕ академика Г.ЦИНЦАДЗЕ	285
ПАМЯТИ Г.ЗВИАДАДЗЕ	287
ПАМЯТИ К.ДЖАПАРИДЗЕ	290
ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ	218

* Резюме

მანგანუმის დაბალხარისხოვანი მადნებისა და შლამების გამდიდრება მშრალი მეთოდით

ლალი ლურჯუმელია, ვახტანგ ტყემალძე, სალომე ტყემალძე, მაიკლ ვაიერმანი

სსიპ ფერდინანდ თავაძის მეტალურგიისა და მასალათმცოდნეობის ინსტიტუტი
აშშ გარემოს დაცვის სააგენტო (EPA)

განხილულია მანგანუმის დაბალხარისხოვანი მადნებისა და გამამდიდრებელი ფაბრიკებიდან გამოყოფილი დიდი რაოდენობით შლამების გამდიდრების ახალი ტექნოლოგიური პროცესი, რომელიც არ საჭიროებს წინასწარ შლამების მექანიკურ გადამუშავებას და ითვალისწინებს მადნის გამდიდრებას მშრალი მეთოდით, მარეგენირებელი აგენტის – ამონიუმის ქლორიდის გამოყენებით. ამონიუმის ქლორიდის გამოყენება გამოირიცხავს შლამებისა და შლამების წარმოქმნას, რაც მომგებიანია ეკონომიკური თვალსაზრისით და ასევე დადებით გავლენას ახდენს ეკოლოგიაზე. ამავე დროს გამდიდრების პროცესში ხდება მისი რეგენერაცია. ამრიგად, აღნიშნული მეთოდი არის ენერგეტიკულად მომგებიანი და ეკოლოგიურად უსაფრთხო. მისი გამოყენება განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია თანამედროვე ეკონომიკურ პირობებში, როდესაც ჰიდრომეტალურგიის ძირითადი რეაგენტი – გოგირდმჟავა, რომლის ღირებულება აღწევს 200 დოლარი/ტ, გამოიყენება მხოლოდ ერთჯერადად და რეგენერაციას არ ექვემდებარება, მაშინ როცა ქლორამონიუმის ტექნოლოგიის ძირითადი რეაგენტი გამოიყენება მრავალჯერადად და მისი რეგენერაციის ღირებულება არ აღემატება 30 დოლარი/ტ.

საქართველოს ეკონომიკური განვითარების ერთ-ერთ ძირითად ამოცანას წარმოადგენს სამთო-მოპოვებითი, ქიმიური და მეტალურგიული დარგების უპირატესი განვითარება, ბუნებრივი რესურსების კომპლექსური გამოყენება, წიაღისეულის გადამუშავებისა და გამდიდრების დროს სასარგებლო კომპონენტის დანაკარგების და გარემოზე წარმოების ნარჩენების მავნე ზემოქმედების შემცირება, რაც თავის მხრივ მჭიდროდაა დაკავშირებული ახალი ტექნოლოგიური პროცესების შემუშავებასა და უკვე არსებული ტექნოლოგიური სექტორების სრულყოფის აუცილებლობასთან [1, 2].

ჭიათურის მანგანუმის მადნის საბადოს ექსპლოატაციის დაწყებიდან დღემდე მოპოვებული ნედლეულის ძირითად მასას შეადგენდა მდიდარი ჟანგეულიანი მადნები. მოპოვებულ მადნებში თანდათან მცირდებოდა მანგანუმის ჟანგეულის შემცველი მინერალები და იზრდებოდა ღარიბი და ძნელად გასამდიდრებელი მადნის ხვედრითი წილი, რამაც გამოიწვია მოპოვებული ნედლეულის ხარისხის შემცირება. თუ პირველ წლებში მასში მანგანუმის ხვედრითი წილი შეადგენდა 37–40%, ამჟამად იგი შემცირებულია 20–23%-მდე. ჭიათურის მანგანუმის მადნების გამამდიდრებელი ფაბრიკების მუშაობის ანალიზის საფუძველზე დადგინდა, რომ მანგანუმის დაბალხარისხოვანი და კარბონატული მადნების გამდიდრების ტექნოლოგია არასრულყოფილადაა შესწავლილი. ამდენად ასეთი მადნების გამდიდრების ტექნოლოგიის სრულყოფა-ინტენსიფიკაცია წარმოადგენს აქტუალურ ამოცანას [1, 2, 3].

დანაკარგების შემცირების მიზნით მეტად აქტუალურია მანგანუმის მადნების გამამდიდრებელი ფაბრიკებიდან გამოყოფილი დიდი რაოდენობით შლამების გამდიდრების ტექნოლოგიის სრულყოფა დამატებითი სასაქონლო პროდუქციის მიღების მიზნით, რაც გაზრდის წარმოების ტექნიკურ-ეკონომიკურ მაჩვენებლებს და მკვეთრად გააუმჯობესებს გარემოს ეკოლოგიურ მდგომარეობას.

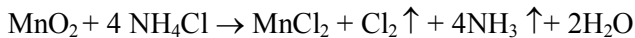
დადგენილია, რომ მანგანუმის დაბალხარისხოვანი და ძნელადგასამდიდრებელი მადნები არ ექვემდებარება პირველად გამდიდრებას, რომელიც მოითხოვს დიდი რაოდენობით ფუჭი ქანების გადამუშავებას. ასეთი მადნებისათვის აუცილებელია გამდიდრების ქიმიური მეთოდების გამოყენება. ქიმიური მეთოდებიდან ყველაზე ეფექტურია გამოტუტვის მეთოდი. არსებობს გამოტუტვის მრავალი მეთოდი: სულფატური, სოდური, სულფიდური, ამიაკური და სხვ. მაგრამ მათი გამოყენება ყოველთვის არ არის ეფექტური და რენტაბელური. ზოგიერთი მადნის (რომლებიც მცირე რაოდენობით შეიცავენ ამა თუ იმ ელემენტს <1%) გამდიდრება აღნიშნული მეთოდებით საერთოდ მიუღწეველია. აღსანიშნავია, რომ გამდიდრების კულებისაგან მანგანუმის სულფატური გამოტუტვის ტექნიკურ-ეკონომიური ეფექტის ასამაღლებლად და ძვირფასი კომპონენტების დანაკარგის შესამცირებლად აუცილებელია გამოყენებული იქნას გოგირდმჟავას ხსნარი, რომელიც შეიცავს SO₂ (30–50 გრ/ლ), რაც მნიშვნელოვნად ართულებს სამუშაო პირობებს [4, 5].

ამიტომ ახლა პრაქტიკაში შემოდის ახალი მიდგომა გამდიდრების მიმართ – მშრალი გამდიდრება მარეგენირებელი აგენტების გამოყენებით. ასეთ აგენტებად შესაძლებელია გამოყენებული იქნას ამონიუმის ჰალოგენიდები: ამონიუმის ფტორიდი ან ქლორიდი. შემუშავებულია ტექნიკურ-ეკონომიკური დასაბუთება და რეგლამენტი ძნელად გასამდიდრებელი მადნისა და გამდიდრების კონცენტრატების ჰალოგენამონიუმის დამუშავებისათვის: Mn, Fe, Cu, Ni - შემცველი მადნებისათვის ქლორამონიუმის დამუშავების ტექნოლოგია; Be, Ni, Zr - შემცველი მადნებისათვის ფტორამონიუმის დამუშავების ტექნოლოგია [6, 7].

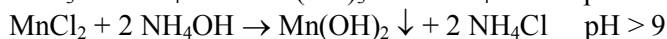
აღნიშნული მეთოდის უპირატესობა მდგომარეობს იმაში, რომ ამონიუმის ჰალოგენიდები ხასიათდებიან მაღალი სელექციურობით მადნის კომპონენტების მიმართ და აგრეთვე აღდგენის მაღალი უნარით, რაც მნიშვნელოვნად ზრდის მიღებული კონცენტრატების ქიმიური გამდიდრების ეფექტურობას და წარმოების ტექნიკურ-ეკონომიკურ მაჩვენებლებს. ამავე დროს გამდიდრების პროცესში ხდება ამონიუმის ჰალოგენიდების რეგენერაცია, რის გამოც შესაძლებელია მათი მრავალჯერადად გამოყენება [7.8].

სწორედ ამას ადასტურებს ჩვენს მიერ ჩატარებული ექსპერიმენტული კვლევები. საპარტნიორო პროექტის - p322b “Regional evaluation of mining related metals contamination risks and inovative remadition technologies” ფარგლებში ჩატარებულ ექსპერიმენტული კვლევები ჭიათურის დაბალხარისხოვანი მადნებისა და შლამების გამდიდრებაზე.

გამდიდრება ხდება მშრალი მეთოდით – მარეგენირებელი აგენტის გამოყენებით. აგენტად ვიყენებთ ამონიუმის ქლორიდს (NH_4Cl). შლამს ვურევთ ამონიუმის ქლორიდს 100–150 მოლზე სტექიომეტრიული კოეფიციენტების შესაბამისად. ნარევეს ვაცხელებთ 300–320°C, იმ დროს განმავლობაში ვიდრე არ შეწყდება ამიაკის, ქლორწყალბადისა და წყლის გამოყოფა. ამ დროს მიმდინარეობს ქიმიური რეაქცია ამონიუმის ქლორიდს, რკინისა და მანგანუმის ოქსიდებს შორის, ხდება Mn-ის აღდგენა (Mn^{+4} გადასვლა Mn^{+2}) და წარმოიქმნება წყალში ხსნადი მარილები: MnCl_2 და FeCl_3 , ხოლო ფუჭი ქანი (SiO_2) ამონიუმის ქლორიდთან არ ურთიერთქმედებს.

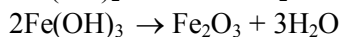
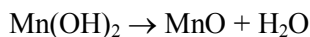


მიღებული კონცენტრატის წყლით გამოტუტვის შემდეგ Mn და Fe მარილების სახით გადადის ხსნაში, ხოლო ფუჭი ქანი – SiO_2 გამოიყოფა მყარი ნალექის სახით. ამრიგად, ხდება ფუჭი ქანის დაცილება ძვირფასი კომპონენტებისაგან. ნალექის გაფილტვრით მიღებულ ხსნარს ვამუშავებთ ამონიუმის ჰიდროქსიდით, ანუ ვახდენთ ხსნარის ამიაკურ გამოტუტვას. ამ დროს სხვადასხვა pH-ის პირობებში გამოილეკება რკინისა და მანგანუმის ჰიდროქსიდები: $\text{pH} < 6$ – $\text{Fe}(\text{OH})_3$ (ნალექი); $\text{pH} > 9$ – $\text{Mn}(\text{OH})_2$. (ნალექი), ხოლო ხსნარში რჩება ამონიუმის ქლორიდი.

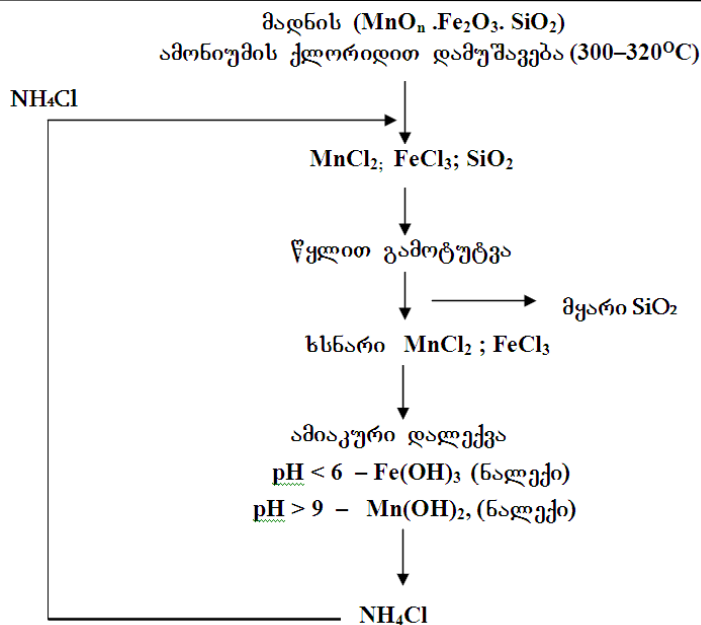


ასე რომ, გამდიდრების პროცესში ხდება NH_4Cl -ის რეგენერაცია. ამიტომ მიღებული ხსნარის აორთქლების შემდეგ შესაძლებელია იგი გამოყენებული იქნას მადნის ახალი ულუფის გამდიდრებისათვის. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ გამდიდრების პროცესში შესაძლებელია მისი მრავალჯერადად გამოყენება, რაც მნიშვნელოვნად შეამცირებს პროცესის თვითღირებულებას.

მიღებული ჰიდროქსიდების მუფელის ღუმელში გამოწვით (800–1000°C) ვღებულობთ შესაბამის ოქსიდებს:



ამრიგად, ჩვენს მიერ შემუშავებულია მანგანუმის დაბალხარისხოვანი მადნებისა და შლამების გამდიდრების პროცესის ტექნოლოგიური სქემა.



აღნიშნული მეთოდით ჭიათურის მანგანუმის მადნების გამამდიდრებელი ფაბრიკებიდან გამოყოფილი შლამების გამდიდრებისას მანგანუმის ოქსიდის გამოსავალი შეადგენს 60–65%.

მეთოდის უპირატესობა ქიმიური გამდიდრების სხვა მეთოდებთან შედარებით განისაზღვრება რამდენიმე ძირითადი ფაქტორით:

მარეგენირებელი აგენტი – ამონიუმის ქლორიდი არის ტექნიკურად ხანძარ- და ფეთქებადუსაფრთხო, მყარი, კრისტალური ნივთიერება, რომლის გამოყენება მიზანშეწონილია ეკოლოგიური თვალსაზრისითაც.

ამონიუმის ქლორიდი ხასიათდება მაღალი სელექციურობით მადნის კომპონენტების მიმართ და აგრეთვე აღდგენის მაღალი უნარით (Mn^{+4} გადაჰყავს Mn^{+2}). ამასთანავე, გამდიდრების პროცესში ხდება მისი რეგენერაცია, რის გამოც შესაძლებელია მისი მრავალჯერადად გამოყენება მანგანუმის კონცენტრატის ახალ-ახალი ულუფების დამუშავებისათვის.

ამონიუმის ქლორიდის გამოყენება გამორიცხავს შლაკებისა და შლამების წარმოქმნას. ნარჩენების არ არსებობა კი დადებითად მოქმედებს ეკონომიკაზე, ანუ არ მოითხოვს მათი უტილიზაციის ხარჯებს და დადებით გავლენას ახდენს ეკოლოგიაზე.

შლამების მშრალი მეთოდით გამდიდრება არ საჭიროებს მადნის წინასწარ მექანიკურ გამდიდრებას.

დასკვნები:

აღნიშნული მეთოდი არის ენერგეტიკულად მომგებიანი, რომლის ხარჯები დაახლოებით 1,5–2 ჯერ უფრო ნაკლებია ჰიდრომეტალურგიულ პროცესებთან შედარებით და ეკოლოგიურად უსაფრთხოა.

მისი გამოყენება განსაკუთრებით მომგებიანია თანამედროვე ეკონომიკურ პირობებში, როდესაც ჰიდრომეტალურგიის ძირითადი რეაგენტი – გოგირდმჟავა, რომლის ღირებულება აღწევს 200 დოლარი/ტ, გამოიყენება მხოლოდ ერთჯერადად და რეგენერაციას არ ექვემდებარება, მაშინ როცა ქლორამონიუმის ტექნოლოგიის ძირითადი რეაგენტი გამოიყენება მრავალჯერადად და მისი რეგენერაციის ღირებულება არ აღემატება 30 დოლარი/ტ-ს.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. შ. შევლაშვილი, გ. წიწილაშვილი. „ჭიათურის მანგანუმის მრეწველობა საუკუნის მანძილზე“. თბილისი, 1997, 85 გვ.
2. Добыча и обогащение полезных ископаемых Грузии. Справочник «Мецниереба», 1989 г., 90 с.
3. Испытание по обогащению смешанных и карбонатных руд Чиатурского месторождения. Кривой-Рог, 1984 г., 86 с.
4. Качан И.Н., Форман Я.И. Обогащение марганцевых руд. Л. Вып. 132, 1963 г., 292 с.

5. Ермолов В.М., Серегин А.Н., Гусев Г.П. и др. Способ совместной переработки окисленных и карбонатных железомарганцевых руд. Патент РФ 2374350.
6. Андреев А. А., Дьяченко А. Н., Крайденко Р. И. Галогенаммонийное разделение минеральной оксидной смеси на индивидуальные компоненты // Химическая промышленность сегодня. 2007, № 3, с. 6–11.
7. Пат. 2314354 РФ. Способ хлораммонийного обезжелезивания минерального сырья / Дьяченко А. Н., Крайденко Р. И.; заявл. 20.02.06; опубл. 10. 01.08.
8. Дьяченко А. Н. Технология переработки окисленных марганцевых руд. Изобретения – В жизнь. Дневник, 27.01.2009.

ENRICHMENT OF LOW-QUALITY MANGANESE ORES AND SLIMES BY MEANS OF DRY ENRICHMENT METHOD

Lali Gurchumelia, Vakhtang Tkemaladze, Salome Tkemaladze, Michael Wireman
Ferdinand Tavadze Institute of Metallurgy and Material Sciences
U. S. Environmental Protection Agency (EPA)

SUMMARY

In the work one discusses new technology process of enrichment low-quality manganese ores and slimes, which doesn't demand a preliminary mechanical enrichment and considers enrichment of slimes by means of dry enrichment (dressing) method, with using regenerating agents – ammonium chloride. Their using excludes formation of slag and slims. At the same time, in the process of enrichment occurs its regeneration. Thus, this method is economically beneficial and environmentally safe. Using above mentioned method is especially profitable in new economic conditions, when hydrometallurgical main reagents (price is 200 \$/t) are used only once and do not undergo the regeneration process, the main reagent of chlorammonium technology is used many times and regeneration value is no more then 30 \$/t.

ОБОГАЩЕНИЕ НИЗКОКАЧЕСТВЕННЫХ МАРГАНЦОВЫХ РУД И ШЛАМОВ СУХИМ МЕТОДОМ

Л.В.Гурчумелия, В.С.Ткемаладзе, С.В.Ткемаладзе, М.Н.Вайерман

Институт металлургии и материаловедения им.Ф.Тавадзе
Агентство защиты окружающей среды США (EPA)

РЕЗЮМЕ

В работе рассматривается новый технологический процесс обогащения низкокачественных марганцевых руд и шламов, который не требует предварительного механического обогащения и учитывает обогащение шламов сухим методом с использованием регенерирующих агентов – хлорида аммония. Использование хлорида аммония исключает выделение шлаков и шламов. В то же время в процессе обогащения происходит его регенерация. Таким образом, указанный метод экономически выгоден и экологически безопасен. Его использование особенно выгодно в современных экономических условиях, когда гидрометаллургический реагент – серная кислота (стоимость 200 доллар/тонн) используется только однократно и не подлежит регенерации, а хлорид аммония в ходе процесса обогащения используется многократно. Стоимость его регенерации не превышает 30 доллар /тонн.

არარეზინული ქიმიის

დარიშხანშემცველი წარმოების ნარჩენები, როგორც მატერიალური რესურსი ახალი ნაერთების მისაღებად*

იზოლდა დიდბარიძე, ნოდარ ლეკიშვილი*, მაია რუსია*, სათუნა ბარბაქაძე*, ზურაბ ფაჩულია*

აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

* ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ქიმიის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი

არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული ნაერთების და არატრადიციული მასალების

სამეცნიერო-კვლევითი ინსტიტუტი

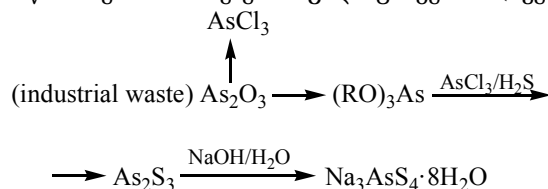
სინთეზირებულია Zn(II), Cd(II), Hg(II), Cu(II), Ni(II) და Co(II)-ის ტეტრათიოარსენატების(V) კოორდინაციული ნაერთები პირიდინთან ზოგადი ფორმულით $[M(Py)_4]_3(AsS_4)_2$. შემუშავებულია მათი სინთეზის ოპტიმალური პირობები. მიღებული კოორდინაციული ნაერთების შედგენილობა და აღნაგობა დადგენილია ელემენტური და რენტგენოგრაფიული ანალიზის და იწ სპექტროსკოპიული მეთოდისა. შესწავლილი იქნა მიღებული კოორდინაციული ნაერთების თერმობილის პროცესი.

ქიმიის მეცნიერების განვითარების თანამედროვე ეტაპზე სულ უფრო აქტუალური ხდება ახალი იაფი ნედლეულის ბაზის მოძიება და შექმნა. სპეციფიკური თვისებების კოორდინაციული ნაერთების მისაღებად დარიშხანის წარმოების ნარჩენების გარდაქმნის შედეგად მიღებული პროდუქტების გამოყენება, ნედლეულის მზარდი დეფიციტის პირობებში, ხელს შეუწყობს შესაბამისი ნაერთების არა მარტო ახალი, კომერციულად საინტერესო ფორმების შემუშავებას, არამედ გადაჭრის მნიშვნელოვან პრობლემას – დაიცავს გარემოს დარიშხანშემცველი ნარჩენებით დაბინძურებისგან. ამ პრობლემის გადაჭრის ერთ-ერთ საინტერესო გზაა დარიშხანშემცველი სამრეწველო ნარჩენებიდან ახალი ბიოაქტიური კოორდინაციული ნაერთების მიღება.

ლიტერატურიდან ცნობილია, რომ პოლიელემენტური კოორდინაციული ნაერთები მრავალ საინტერესო თვისებას ავლენენ, რაც მათი ფართო, პრაქტიკული გამოყენების შესაძლებლობას იძლევა. უკანასკნელ წლებში ამ ტიპის ნაერთებიდან განსაკუთრებულ ინტერესს იწვევს ისეთი კომპლექს-ნაერთები, რომლებიც აზოტსა და d-მეტალებთან ერთად შეიცავენ ტეტრათიოარსენატის ჯგუფებს [1-3].

ჩვენი კვლევის მიზანია ზემოაღნიშნული წარმოების ნარჩენების გარდაქმნით მიღებული პროდუქტების (ტეტრათიოარსენატების) ბაზაზე ერთ-ერთ პერსპექტიულ და ხელმისაწვდომ აზოტშემცველ ლიგანდთან – პირიდინთან თუთიის, ვერცხლისწყლის(II), სპილენძის(II) და ნიკელის(II) კოორდინაციული ნაერთების მიღება და შესწავლა, რომლებსაც შესაძლოა მაღალი ბიო-აქტიურობა აღმოაჩნდეთ.

გამოსავალ ნივთიერებებად გამოვიყენეთ ზემოაღნიშნულ მეტალთა წყალში ხსნადი მარილები – თუთიის აცეტატი, ვერცხლისწყლის(II) ნიტრატი, სპილენძის(II) სულფატი და ნიკელის(II) ქლორიდი. დარიშხანშემცველი ნაერთებიდან გამოვიყენეთ ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატი $Na_3AsS_4 \cdot 8H_2O$, რომელიც მივიღეთ დარიშხანის წარმოების ნარჩენების გადამუშავებით (სქემა 1) [4, 5]:

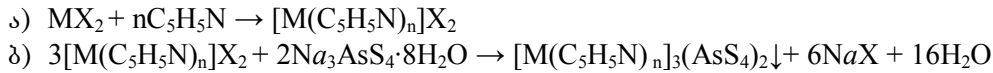


სქემა 1

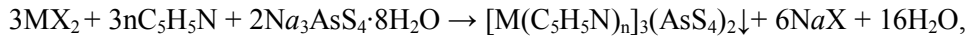
იწ სპექტრები გადაღებულ იქნა სპექტრომეტრზე “SPECORD IR-75 ვაზელინის ზეთში. რენტგენოგრაფიული კვლევები ჩატარდა დიფრაქტომეტრზე “ДРОН-3М”. თერმოგრაფიული კვლევები ჩატარდა დერივატოგრაფზე “Q-1500” (F. Paulik, J. Paulik, L. Erdely, უნგრეთი) ჰაერზე საკვლევი ნიმუშების 1000°C -მდე $10^\circ/\text{წთ}$ სიჩქარით გახურებით. ეტალონური ნივთიერება – კორუნდი.

* ნაშრომი ეძღვნება ჩვენი მასწავლებლის, პროფესორ რომან გიგაურის დაბადებიდან 75-ე წლისთავს

d-მეტალთა პირიდინატების სინთეზი მიმდინარეობს მიმოცვლის რეაქციით – გარდამავალ მეტალთა მარილების პირიდინატებზე ეკვივალენტური რაოდენობა ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატის ნაჯერი ხსნარის მოქმედებით (სქემა 2):



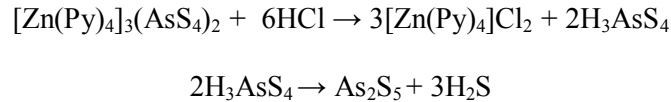
ან შევსაბუღა:



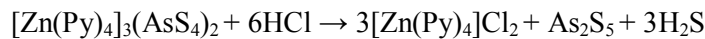
სადაც, M = Zn, Cd, Ni ან Hg, X = CH₃COO⁻, NO₃⁻, n = 4.

სქემა 2

მიღებული კომპლექსნაერთები წარმოადგენენ მყარ, შეფერილ, წვრილკრისტალურ ნივთიერებებს, რომლებიც შეზღუდულად იხსნებიან დიმეთილფორმამიდეში, არ იხსნებიან წყალში, ტუტეებში, ეთილის სპირტსა და თხევად ნაჯერ ნახშირწყალბადებში, მაღალ ტემპერატურაზე გააღობამდე იშლებიან, მჟავით დამუშავებისას განიცდიან გარდაქმნას დარიშხანის(V) სულფიდის წარმოქმნით (სქემა 3):



ან შევსაბუღა:



სქემა 3

მიღებული ნაერთების შედგენილობა და აღნაგობა დადგენილია საკვლევი ნიმუშების ელემენტური ანალიზის (ცხრ. 1), ინფრაწითელი სპექტროსკოპიული და რენტგენოფაზური გამოკვლევების მონაცემებით.

ცხრილი 1. სინთეზირებული [M(Py)_n]₃(AsS₄)₂-ის ტიპის კომპლექსნაერთების ელემენტური ანალიზის მონაცემები და გამოსავლიანობა

№	კომპლექსნაერთის ფორმულა	ფერი	ელემენტური ანალიზი გამოთვლილია/ნაპოვნია, %				გამოსავ-ლიანობა, %
			M	As	N	S	
I	[Cu(C ₅ H ₅ N) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂	ნაცრისფერი	12,33/	9,71/	10,87/	16,57/	93,4
			12,11	9,94	10,64	16,71	
II	[Zn(C ₅ H ₅ N) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂	ღია ყვითელი	12,64/	9,67/	10,83/	16,51/	96,5
			12,77	9,49	10,58	16,69	
III	[Cd(C ₅ H ₅ N) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂	სტაფილოს-ფერი	19,22/	8,87/	9,93/	15,13/	95,3
			20,02	8,81	9,84	15,26	
IV	[Hg(C ₅ H ₅ N) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂	ნაცრისფერი	30,77/	7,66/	8,58/	13,08/	95,2
			29,89	7,85	8,23	13,02	
V	[Ni(C ₅ H ₅ N) ₆] ₃ (AsS ₄) ₂	შავი	8,82/	7,48/	12,56/	12,76/	92,8
			9,19	7,71	12,32	12,51	

სინთეზირებული ნაერთების იწ სპექტრებიდან ჩანს, რომ მათში შეიმჩნევა AsS₄³⁻ ჯგუფისთვის დამახასიათებელი ვალენტური რხევის შთანთქმის ზოლები 420 სმ⁻¹-ზე [3, 6], ხოლო დეფორმირებული რხევის – 470 სმ⁻¹ უბანში [7]. გარდა ამისა, როგორც ცნობილია [8], ცენტრალურ ატომთან თავისუფალი ლიგანდის კოორდინირებისას შთანთქმის ზოლის მნიშვნელობა წაინაცვლებს ~8-30 სმ⁻¹-

ით. არაკოორდინირებული პირიდინის $\nu(\text{C}=\text{N})$ შთანთქმის ზოლი მდებარეობს 1580 სმ^{-1} უბანში [9], მაშინ როდესაც ჩვენს მიერ სინთეზირებულ ნაერთთა სპექტრებში იგივე შთანთქმის ზოლი ვლინდება $1600\text{-}1610 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, რაც ცალსახად ადასტურებს ამ ნაერთებში მეტალის იონებთან კოორდინირებული პირიდინის არსებობას.

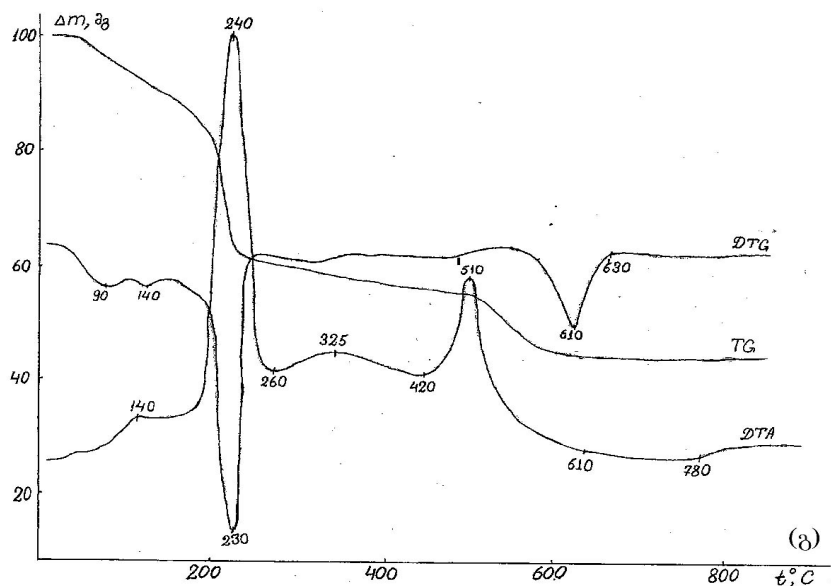
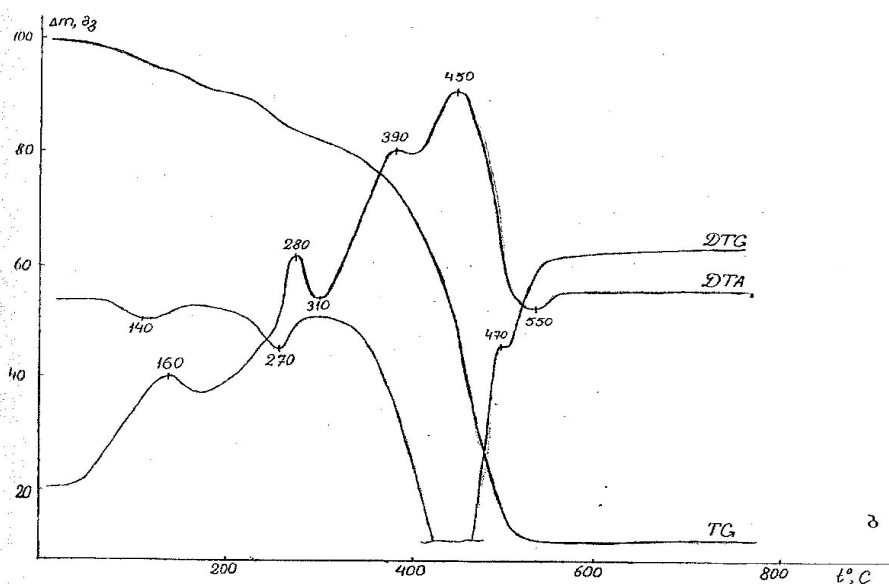
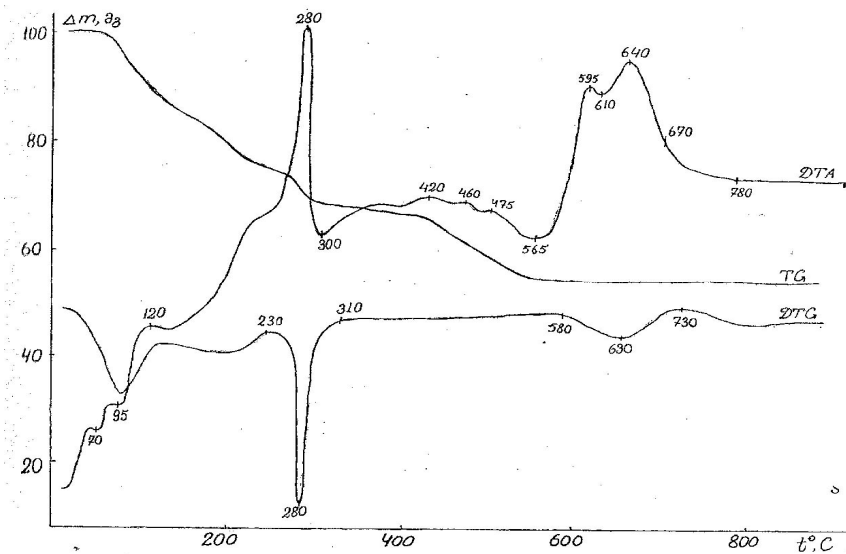
ტეტრათიოარსენატ-იონების შთანთქმის ზოლების ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატ-იონების შთანთქმის ზოლებთან საკმაოდ კარგი დამთხვევა იმაზე მეტყველებს, რომ ხსენებული ანიონი კოორდინაციული ნაერთის გარე სფეროს ქმნის.

სინთეზირებულ ნივთიერებათა რენტგენოფაზური ანალიზის მონაცემები (ცხრ. 2), ლიტერატურაში მოცემული კლასიფიკაციის თანახმად [10], მოწმობს, რომ მიღებული ნაერთები თავიანთი სტრუქტურის ბუნების მიხედვით სულფომარილების ქვეკატეგორიის მიეკუთვნება. განსაკუთრებულ ყურადღებას იმსახურებს კრისტალური სტრუქტურის მოწესრიგებულობაზე კატიონის გავლენა. მაგალითად, სპილენძი(II) და ვერცხლისწყალი(II) ხელს უწყობს წვრილდისპერსული ფაზის წარმოქმნას, რომელიც რენტგენოამორფულ მდგომარეობას უახლოვდება [11].

ცხრილი 2. ზოგიერთ d-მეტალთა ტეტრათიოარსენატების (V) პირიდინული კომპლექსების რენტგენოფაზური ანალიზის შედეგები

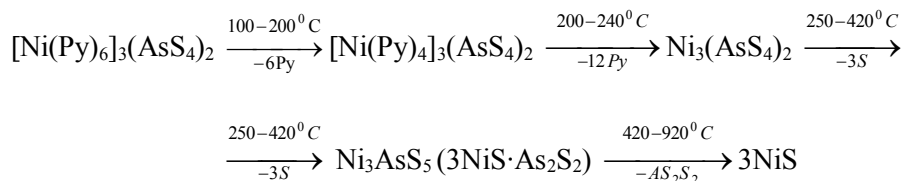
[Cu(Py) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂		[Cd(Py) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂		[Ni(Py) ₆] ₃ (AsS ₄) ₂		[Hg(Py) ₄] ₃ (AsS ₄) ₂	
I/I ₀	D α/n	I/I ₀	d α/n	I/I ₀	d α/n	I/I ₀	D α/n
20	11,33	20	13,0	2	11,0	4	11,6
100	8,19	15	9,07	3	7,86	2	7,69
20	7,23	10	7,0	3	6,81	2	7,26
20	6,56	25	6,41	4	6,34	5	6,10
10	5,71	15	5,96	5	5,43	5	5,62
10	5,33	10	4,33	4	4,76	6	5,00
10	5,07	35	3,90	3	3,81	8	4,73
20	4,38	25	3,27	6	3,58	10	4,62
20	4,04	15	3,17	2	3,27	7	4,33
15	3,87	15	3,05	3	2,98	9	3,92
5	3,24	20	2,98	10	2,82	3	3,75
5	3,16	20	2,94	3	2,56	3	2,82
5	3,00	15	2,43	2	2,51	3	2,46
5	2,95	30	2,23	3	2,25	2	2,18
5	2,75	30	2,19	2	2,19	2	2,04
8	2,53	20	2,15	3	2,12	3	1,93
5	2,44	10	2,08	4	1,98	3	1,86
10	2,11	15	1,97	3	1,86		
10	1,97	15	1,94				
10	1,92	40	1,83				
		100	1,77				

თერმოგრაფიული კვლევის შედეგებიდან ჩანს, რომ სპილენძის და თუთიის კომპლექსნაერთების თერმული დაშლის (თერმოლიზის) პროცესები თითქმის იდენტურია (სურ. 1ა). საწყის ეტაპზე მიმდინარეობს კომპლექსნაერთის მოლეკულიდან ლიგანდის მოწყვეტა, ხოლო შემდეგ გრძელდება ტეტრათიოარსენატის(V) ეტაპობრივი თერმული დაშლა [1].

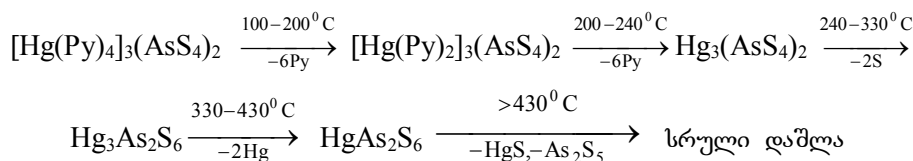


სურათი 1. სინთეზირებულ ნაერთთა თერმოგრაფიკრამები
 ა) $[Zn(Py)_4]_3(AsS_4)_2$; ბ) $[Hg(Py)_4]_3(AsS_4)_2$; გ) $[Ni(Py)_6]_3(AsS_4)_2$

შესაძლებელია განვასხვავოთ მიღებული კომპლექსნაერთების დაშლის ორი ტიპი: ნიკელის ტეტრათიოარსენატის(V) პირიდინული კომპლექსისა (სქემა 3) და ვერცხლისწყლის(II) ტეტრათიოარსენატის(V) პირიდინული კომპლექსის (სქემა 4) თერმოლიზი:



სქემა 3



სქემა 4

$[\text{Ni(Py)}_6]_3(\text{AsS}_4)_2$ -ის ნიმუშის თერმოლიზი (სურ. 1გ) იწყება 100°C -დან. თერმოგრავიმეტრიულმა ანალიზმა გვიჩვენა, რომ ლიგანდის პირველი 6 მოლი წყდება 200°C -მდე, რასაც შეესაბამება მასის კლება 23,0% (თეორ. 23,6%). $200-250^\circ\text{C}$ -ის ინტერვალში შეინიშნება საკმაოდ მნიშვნელოვანი ენდოთერმული ეფექტი, მინიმუმით 235°C -ზე. ამ ინტერვალში წყდება ლიგანდის დანარჩენი 12 მოლი. შესაბამისად ნიმუშის მასის კლება - 46,8%-ია (თეორიული 47,28%). შემდეგ ნიმუშის თერმული დაშლა გრძელდება ისე, როგორც შესაბამისი ნორმალური მარილის შემთხვევაში.

როგორც სქემა 3-ის და სქემა 4-ის შედარებიდან ჩანს, განსხვავებულად უნდა მიმდინარეობდეს Hg(II) ტეტრათიოარსენატის(V) პირიდინული კომპლექსის $\{[\text{Hg(Py)}_4]_3(\text{AsS}_4)_2\}$ თერმული დაშლა (სურ. 1ბ). ლიგანდის მოცილება აქაც საფეხურებრივად შეიძლება გამოისახოს, - პირველ საფეხურზე, $100-200^\circ\text{C}$ -ის ინტერვალში, კომპლექსი კარგავს 6 მოლ პირიდინს, ხოლო დანარჩენ 6 მოლს - $200-240^\circ\text{C}$ -ის ინტერვალში. მასის კლება ორივე საფეხურზე შეადგენს 31%-ს (თეორ. 30,77%). ლიგანდის მოცილების შემდეგ თერმული დაშლის პროცესი გრძელდება ისევე, როგორც შესაბამისი ნორმალური მარილის შემთხვევაში [1].

თერმოგრავიმეტრული ანალიზის მონაცემებთან ერთად, მიღებულ შედეგებს ადასტურებს ლიტერატურაში აღწერილი შუალედური პროდუქტების თერმული დაშლის პროცესები, აგრეთვე სხვადასხვა ეტაპზე წარმოქმნილი ნაშთების შედგენილობის ანალიზი [1, 5].

სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (DFT) მეთოდის გამოყენებით გამოთვლილი იქნა $[\text{Zn}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Cd}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Hg}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Cu}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$ (სქემა 5) ტეტრაედრული კომპლექსური იონების სრული ენერგია და მათში მეტალი-აზოტის ბმის რიგები (ცხრ. 3). გამოთვლებისთვის გამოყენებული იქნა ბაზისი ფსევდოპოტენციალით (მხოლოდ სავალენტო ელექტრონები), რომელიც ითვალისწინებს რელატივისტურ შესწორებებს.

ცხრილი 3

იონი	სრული ენერგია, a.u.	ბმის რიგი			
		N ₁	N ₂	N ₃	N ₄
Zn ²⁺	-390.8864	0.47	0.47	0.47	0.47
Cd ²⁺	-331.6033	0.35	0.35	0.35	0.35
Hg ²⁺	-318.4536	0.36	0.36	0.36	0.36
Cu ²⁺	-361.2228	0.54	0.54	0.54	0.54

ჩატარებული იქნა მიღებული კოორდინაციული ნაერთების მეტალ-პირიდინული ფრაგმენტის ბიოაქტიურობის თეორიული შეფასება კომპიუტერული პროგრამით PASS C&T [11], ნაერთების აქტიურობის ალბათობის შეფასება ხორციელდება P_a (აქტ.) და P_i (არააქტ.) პარამეტრებით. მანამდე

გამოთვლილი იქნა Na_3AsS_4 ფრაგმენტის ბიოაქტიურობა, რომელსაც აღმოაჩნდა $P_a=0,507-0,898$ antiprotozoal (*Amoeba*) და Antihelminthic (*Nematodes, Fasciola*) აქტიურობა. გამოთვლებმა გვიჩვენა, რომ სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთის მეტალ-პირიდინული ფრაგმენტი, სავარაუდოდ, ასევე გამოავლენს მაღალ ბიოაქტიურობას. შერჩეულ სტრუქტურებს მაღალი ალბათობით ($P_a=0,570-0,900$) (ცხრ. 4) შესაძლოა აღმოაჩნდეთ შემდეგი ტიპის ბიოლოგიური აქტიურობა: *Atherosclerosis treatment, Antineoplastic, Antiseborrheic, Antiviral Picornavirus, Cytoprotectant* და სხვ. ზემოაღნიშნული ფრაგმენტების შერწყმა, როგორც ჩანს, პერსპექტიულს ხდის ფართო სპექტრის ანტიმიკრობული და ანტიპლემინთური თვისებების კოორდინაციული ნაერთების შექმნას.

ცხრილი 4. d-მეტალთა ტეტრათიოარსენატების (V) მეტალ-პირიდინული ფრაგმენტის შედარებითი (ვირტუალური) ბიოლოგიური აქტიურობის თეორიული გათვლის შედეგები

Compound	Atherosclerosis treatment	Antineoplastic	Anemia, sideroblastic	Antiseborrheic	Antiviral (Picornavirus)	Cytoprotectant	Antineurotic	Insulin promoter
	P_a / P_i							
$[\text{Cu}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]_3(\text{AsS}_4)_2$	-	-	0,874/ 0,002	0,870/ 0,007	0,666/ 0,009	0,655/ 0,013	0,679/ 0,046	0,625/ 0,012
$[\text{Zn}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]_3(\text{AsS}_4)_2$	0,991/ 0,002	0,892/ 0,005	0,859/ 0,003	0,852/ 0,010	0,639/ 0,012	0,637/ 0,018	0,624/ 0,063	0,570/ 0,018
$[\text{Cd}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]_3(\text{AsS}_4)_2$	0,987/ 0,002	0,953/ 0,004	0,822/ 0,004	0,852/ 0,010	0,583/ 0,023	0,598/ 0,031	0,624/ 0,063	0,570/ 0,018
$[\text{Hg}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]_3(\text{AsS}_4)_2$	0,987/ 0,002	0,953/ 0,004	0,852/ 0,010	0,852/ 0,010	0,563/ 0,023	0,578/ 0,031	0,624/ 0,063	0,563/ 0,018
$[\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_6]_3(\text{AsS}_4)_2$	-	0,945/ 0,004	0,867/ 0,003	0,839/ 0,012	0,574/ 0,025	0,602/ 0,030	0,601/ 0,071	0,579/ 0,025
$[\text{Co}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_6]_3(\text{AsS}_4)_2$	-	-	0,859/ 0,003	0,886/ 0,005	0,645/ 0,011	0,640/ 0,017	0,725/ 0,034	0,673/ 0,008

დასკვნები:

- მიღებულია ზოგიერთი d-მეტალის [Cu(II), Zn(II), Cd(II), Hg(II), Ni(II)] ტეტრათიოარსენატების კოორდინაციული ნაერთები პირიდინთან;
- სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (DFT) მეთოდის გამოყენებით გათვლილ იქნა $[\text{Zn}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Cd}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Hg}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$, $[\text{Cu}(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]^{2+}$ (სქემა 5) ტეტრაედრული კომპლექსური იონების სრული ენერგია და მათში მეტალი-აზოტის ბმის რიგები;
- დადგენილია, რომ მიღებული კოორდინაციული ნაერთები წარმოადგენენ კატიონურ კომპლექსებს, ლიგანდი მონოდენტურია, ხოლო ტეტრათიოარსენატ-იონი იმყოფება გარე სფეროში;
- ელემენტური ანალიზით და ფიზიკური ანალიზის სხვადასხვა მეთოდით დადასტურებულია მიღებული ნაერთების ინდივიდუალობა. შესწავლილია მათი თერმომდგრადობა და თერმოლიზის სავარაუდო პროცესი;
- ჩატარებულია მიღებული კომპლექსნაერთების ვირტუალური (თეორიული) ბიოსკრინინგი.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. I. Didbaridze, G. Khelashvili, A. Chubinidze, R. Gigauri. Synthesis and Study of Tetrathioarsenates of d¹⁰-metals. Bulletin of the Georgian Academy of Sciences. Vol. 157, №1, pp. 56-59, 1998. Tbilisi.
2. M. Samkharadze, M. Rusia, N. Lekishvili, Kh. Barbakadze, N. Kakhidze, Z. Pachulia, R. Gigauri†. Bioactive Complex Compounds Based on Transition Metals and some Nitrogencontaining Ligands: Synthesis, Structure and Properties. Oxid. Commun. (Intern. J.). Vol. 35, №3, 633-650, 2012.

3. I. Didbaridze, G. Khelashvili, M. Rusia, N. Endeladze, R. Gigauri. Sodium Tetrathioarsenate as a precipitate of ammoniate ions of Transitional Metals. Bulletin of the Georgian Academy of Sciences. Vol. 157, №2, 1998. Tbilisi, pp. 238-240.
4. Г.М. Брауер. Руководство по неорганическому синтезу. «Мир», 1985, т.2, с.126-127.
5. Р.Д. Гигаური. Синтез и превращение органических соединений мышьяка на базе As_4O_6 . Дис. Докт. Техн. Наук. Тбилиси, 1988.
6. ი. დიდბარიძე, მ. სამხარაძე, ნ. რუსია, რ. გიგაური. თუთიის, კადმიუმის და ვერცხლისწყლის ტეტრათიოარსენატების კოორდინაციული ნაერთები ორთო-ფენილენდიამინთან. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, ტ. 34. №1, გვ. 9-12, 2008,
7. К.Накамото. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. М.: Мир, 1966, 411 с.
8. Р.Р. Шагидуллин, С.В. Изосимова. (As=S) в ИК спектрах КР. Изв. АН СССР. Сер. Хим. 1976, №5, том I, 863 с.
9. Л. Беллами. Инфракрасные спектры сложных молекул. Л.:изд-во «Иностран. Лит». 1963, 591 с.
10. В.И. Михеев, Э.П. Сальдау. Рентгенометрический определитель минералов. Л.: «Недра». 1965, т. II. 347 с.
11. Г. Липсон, Г. Стипл. Интерпретация порошковых рентгенограмм. М.: Мир. 1972, т. II. 384 с.
12. A. Sadim, A. Lagunin, D. Filiminov, V. Poroikov. Chem.-Farm. J. 36, 10, 21-26, 2002.

ARSENIC-CONTAINING INDUSTRIAL WASTE AS THE MATERIAL RESOURCE FOR OBTAINING OF A NEW COMPOUNDS

Izolda Didbaridze, Nodar Lekishvili*, Maia Rusia*, Khatuna Barbakadze*, Zurab Pachulia*

Kutaisi Akaki Tsereteli State University

**Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

Coordination compounds of tetrathioarsenates(V) of Zn(II), Cd(II), Hg(II), Cu(II), Ni(II) and Co(II) with Pyridine by general formula $[M(Py)_4]_3(AsS_4)_2$ have been synthesized. Optimal conditions of their synthesis have been developed. The composition and structure of the synthesized complexes have been determined by elemental analysis, X-ray diffraction patterns and IR-spectroscopy. The thermal destruction process of the obtained complex-compounds have been studied.

МЫШЬЯКСОДЕРЖАЩИЕ ПРОМЫШЛЕННЫЕ ОТХОДЫ КАК МАТЕРИАЛЬНЫЙ РЕСУРС ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

И.С.Дидбаридзе, Н.Г.Лекишвили*, М.Ш.Русия*, Х.А.Барбакадзе*, З.Г.Пачулия*

Кутаисский Государственный Университет им. Акакия Церетели

**Тбилисский Государственный Университет им. И. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Синтезированы координационные соединения тетратиоарсенатов(V) Zn(II), Cd(II), Hg(II), Cu(II), Ni(II) и Co(II) с пиридином общей формулой $[M(Py)_4]_3(AsS_4)_2$. Разработаны оптимальные условия их синтеза. Состав и структура синтезируемых комплексов были определены методами элементного анализа, рентгенографии и ИК-спектроскопии. Изучен процесс термолиза полученных координационных соединений.

არაორბანული ქიმიის

ზოგიერთი აზოტშემცველი დიფუნქციური ლიგანდის d-მეტალეტან კომპლექსწარმოქმნის უნარის და გიოაქტიურობის თეორიული გამოკვლევა

ნოდარ ლევიშვილი, მაია რუსია, ზურაბ ფაჩულია, ხათუნა ბარბაქაძე, ქეთევან კოკია, ქრისტინე გიორგაძე, მაია ცინცაძე
 ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
 ქიმიის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი
 არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული ნაერთების და არატრადიციული მასალების სამეცნიერო-კვლევითი ინსტიტუტი

ჩატარებულია აზოტშემცველი დიფუნქციური ლიგანდების – 2-ამინოფენოლის, 1,2-დიამინობენზოლისა და 1,2-N,N'-დიმეთილდიამინობენზოლის d-მეტალეტან კომპლექსწარმოქმნის უნარის კვლევა. ნახევრად-ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით განსაზღვრული იქნა მათი გეომეტრიული მახასიათებლები, ატომებზე ეფექტური მუხტები, ელექტრონული სიმკვრივე და ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება. დადგენილი იქნა, რომ შერჩეული ამინოფენოლი და დიამინები წარმოადგენენ ბიდენტატურ ლიგანდებს და d-მეტალეტან წარმოქმნიან კოორდინაციულ ნაერთებს ხუთწევრიანი ციკლის სახით. ჩატარებული იქნა ლიგანდების ვირტუალური ბიოსკრინინგი.

აზოტშემცველმა ნაერთებმა ყურადღება მიიქცევს, როგორც ლიგანდებმა სხვადასხვა მეტალმემცველი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზისათვის [1–6]. მათგან აღსანიშნავია შედარებით ხელმისაწვდომი 2,2-დიპირიდინი და ეთილენდიამინი, რომლებიც დიდხანია ინტენსიურად შეისწავლება [6]. სინთეზირებულია როგორც ხელატური, ისე კატიონ-ანიონური კოორდინაციული ნაერთები, რომელთაც საინტერესო სტრუქტურა და თვისებები აღმოაჩნდათ [6, 7]. ამის გათვალისწინებით, პერსპექტიულად მიგვაჩნია, გაფართოვდეს აზოტშემცველი დიფუნქციური ნაერთების კოორდინაციულ ქიმიაში გამოყენების შესაძლებლობები.

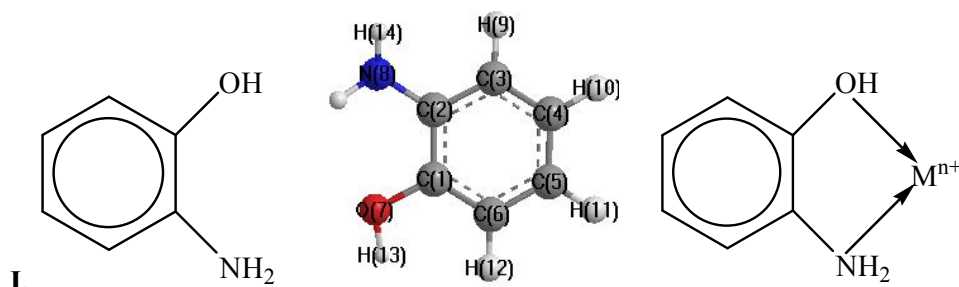
ზემოაღნიშნულიდან გამომდინარე, მოვახდინეთ 2-ამინოფენოლის, 1,2-დიამინობენზოლისა და 1,2-N,N'-დიმეთილდიამინობენზოლის კომპლექსწარმოქმნის უნარის შეფასება ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური მეთოდით AM1 (Austin Model 1) [CS MOPAC (Chem 3D Ultra-version 8.03)] [8,9]. შერჩეული ლიგანდების მოლეკულური სტრუქტურის ოპტიმიზაციის შემდეგ [8] განვსაზღვრეთ მათი სავალენტო კუთხეები (ცხრილი 1), ატომებზე ეფექტური (ფარდობითი) მუხტები, ელექტრონული სიმკვრივე და ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება. ლიგანდები შერჩეული იქნა ბენზოლის ბირთვში ჩანაცვლებული ჯგუფების განსხვავებული ელექტროდონორული ბუნების გათვალისწინებით.

ატომების ელექტროდონორულ ბუნებას უპირატესად განსაზღვრავს არა მათი ჰიბრიდული მდგომარეობა [10], არამედ ატომებზე ფარდობითი მუხტების სიდიდე და ატომთა ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება.

ცხრილი 1. ატომებს შორის სავალენტო კუთხეები შერჩეული ლიგანდების მოლეკულაში

ლიგანდი	სავალენტო კუთხეები	
2-ამინოფენოლი	$\angle C_1-O_7-H_{13}$ 107.5°	$\angle C_2-N_8-H_{14}$ 113.3°
1,2-დიამინობენზოლი	$\angle C_1-N_7-H_{13}$ 112.3°	$\angle C_2-N_8-H_{15}$ 112.4°
1,2-N,N'-დიმეთილდიამინობენზოლი	$\angle C_1-N_7-C_9$ 118.9°	$\angle C_2-N_8-C_{10}$ 115.1°

2-ამინოფენოლის (სქემა 1) ატომებზე ეფექტური (ფარდობითი) მუხტების მნიშვნელობა (ცხრილი 2) გვიჩვენებს, რომ პოტენციურად ელექტროდონორულ ატომებს წარმოადგენს O_7 ($q = -0.266838$) და N_8 ($q_8 = -0.309402$). ატომთა ორბიტალების ელექტრონებით დასახლების (ცხრილი 3) მიხედვით შეიძლება დავასკვნათ, რომ ამ ატომებს შეუძლიათ, მაგალითად, d-მეტალეტან იონებთან (M^{n+}) σ-ბმის წარმოქმნა დონორულ-აქცეპტორული მექანიზმით ხუთწევრიანი ციკლის წარმოქმნით:



სქემა 1.

ცხრილი 2. ატომთა ფარდობითი მუხტი (q_i) და ელექტრონული სიმკვრივე [q_i(d)]

ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q _i	ელექტრონული სიმკვრივე, q _i (d)	ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q _i	ელექტრონული სიმკვრივე, q _i (d)
C ₁	0.016324	3.9837	H ₉	0.135392	0.8646
C ₂	0.032766	3.9672	H ₁₀	0.131956	0.8680
C ₃	-0.159407	4.1594	H ₁₁	0.132979	0.8670
C ₄	-0.125533	4.1255	H ₁₂	0.131012	0.8690
C ₅	-0.134513	4.1345	H ₁₃	0.220574	0.7794
C ₆	-0.174840	4.1748	H ₁₄	0.176909	0.8231
O ₇	-0.266838	6.2668	H ₁₅	0.192621	0.8074
N ₈	-0.309402	5.3094			

ცხრილი 3. ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება

ატომი	2s	2p _x	2p _y	2p _z
O ₇	1.86222	1.23746	1.25606	1.91109
N ₈	1.53036	1.09858	1.04204	1.63842

1,2-დიაამინობენზოლის და 1,2-N,N'-დიმეთილდიაამინობენზოლის ელექტრონული სტრუქტურის (ატომებზე ფარდობითი მუხტების) გათვლებმა (ცხრილი 4-5) ასევე გვიჩვენა, რომ პოტენციურად ელექტროდონორულ ატომებს წარმოადგენს N₇ და N₈ (სქემა 3). ზემოაღნიშნული ნაერთების მოლეკულაში N₇-ის და N₈-ის ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლების (ცხრილი 6-7) მნიშვნელობიდან გამომდინარე, 2-ამინოფენოლის ანალოგიურად, ისინი გვევლინებიან, როგორც ბიდენტატური ლიგანდები, რომლებსაც d-მეტალების იონებთან (Mⁿ⁺) შეუძლიათ წარმოქმნან კოორდინაციული ნაერთები ხუთწევრიანი ციკლის სახით (სქემა 2-3).

ცხრილი 4. 1,2-დიაამინობენზოლის მოლეკულაში ატომთა ფარდობითი მუხტი (q_i) და ელექტრონული სიმკვრივე [q_i(d)]

ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q _i	ელექტრონული სიმკვრივე, q _i (d)	ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q _i	ელექტრონული სიმკვრივე, q _i (d)
C ₁	0.000827	3.9992	H ₉	0.128290	0.8717
C ₂	0.000585	3.9994	H ₁₀	0.130380	0.8696
C ₃	-0.161557	4.1616	H ₁₁	0.130229	0.8698
C ₄	-0.131921	4.1319	H ₁₂	0.128432	0.8716
C ₅	-0.131866	4.1319	H ₁₃	0.169727	0.8303
C ₆	-0.161681	4.1617	H ₁₄	0.176880	0.8231
N ₇	-0.312493	5.3125	H ₁₅	0.169737	0.8303
N ₈	-0.312456	5.3125	H ₁₆	0.176888	0.8231

ცხრილი 5. 1,2-N,N'-დიმეთილდიამინობენზოლის ატომთა ფარდობითი მუხტი (q_i) და ელექტრონული სიმკვრივე [$q_i(d)$]

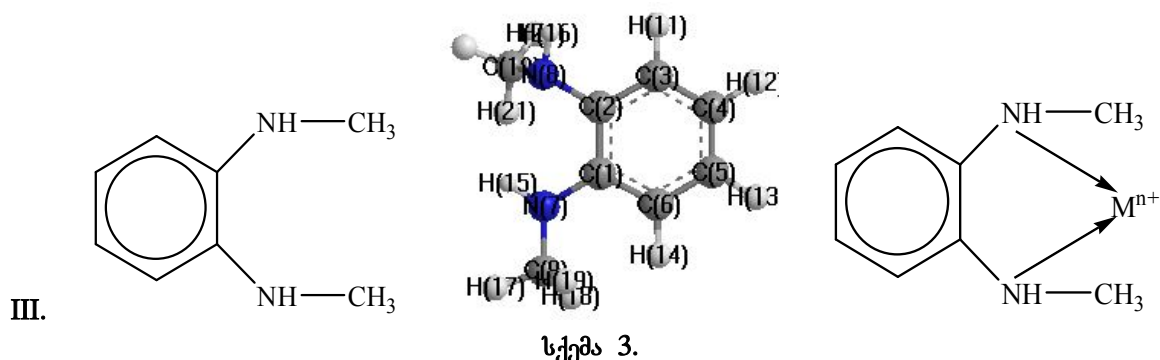
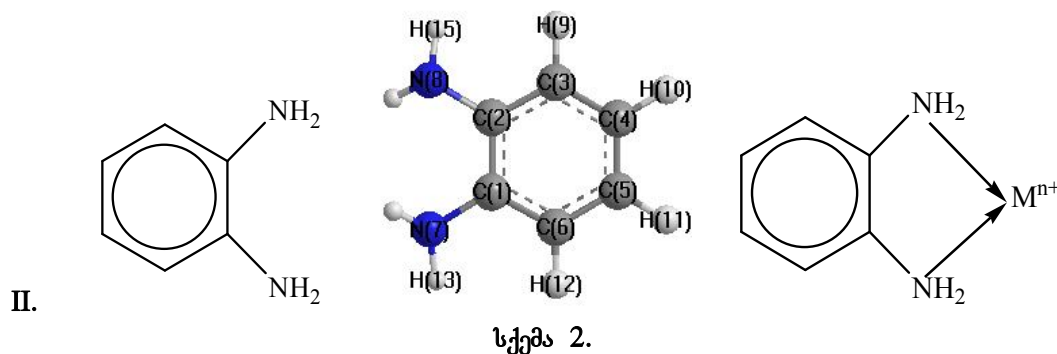
ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q_i	ელექტრონული სიმკვრივე, $q_i(d)$	ატომი, i	ფარდობითი მუხტი, q_i	ელექტრონული სიმკვრივე, $q_i(d)$
C ₁	0.075445	3.9246	H ₁₂	0.130420	0.8696
C ₂	-0.051816	4.0518	H ₁₃	0.129186	0.8708
C ₃	-0.134065	4.1341	H ₁₄	0.132871	0.8671
C ₄	-0.160116	4.1601	H ₁₅	0.208146	0.7919
C ₅	-0.104469	4.1045	H ₁₆	0.163883	0.8361
C ₆	-0.184851	4.1849	H ₁₇	0.083273	0.9167
N ₇	-0.284916	5.2849	H ₁₈	0.084345	0.9157
N ₈	-0.267128	5.2671	H ₁₉	0.055301	0.9447
C ₉	-0.102297	4.1023	H ₂₀	0.046721	0.9533
C ₁₀	-0.125361	4.1254	H ₂₁	0.099876	0.9001
H ₁₁	0.125516	0.8745	H ₂₂	0.080036	0.9200

ცხრილი 6. 1,2-დიამინობენზოლის მოლეკულაში ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება

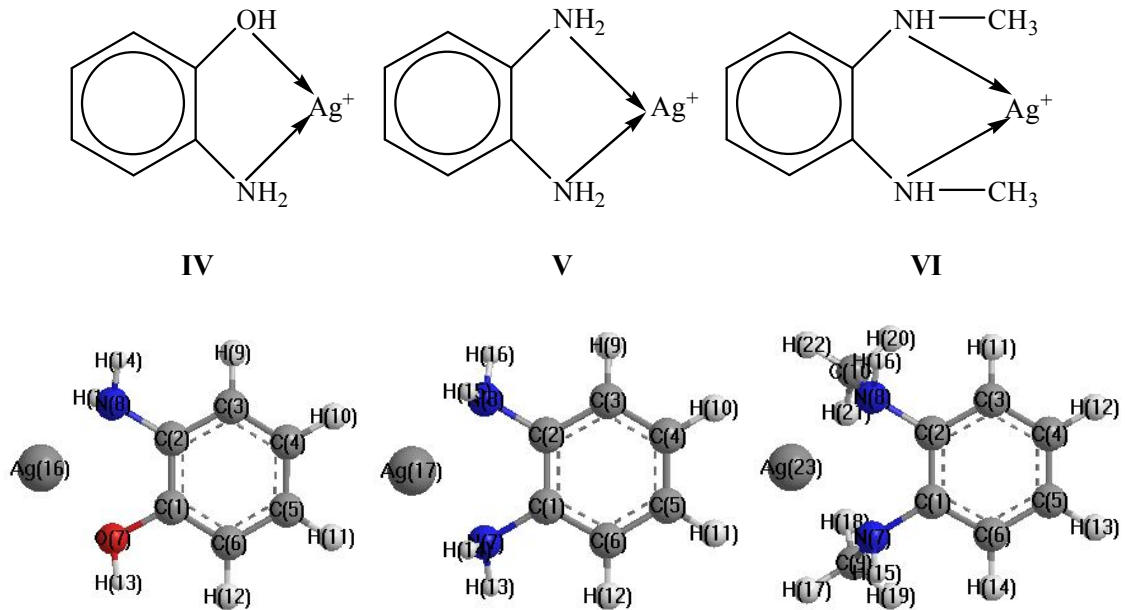
ატომი	2s	2p _x	2p _y	2p _z
N ₇	1.54585	1.08161	1.09567	1.58936
N ₈	1.54589	1.08189	1.09226	1.59241

ცხრილი 7. 1,2-N,N'-დიმეთილდიამინობენზოლის ატომური ორბიტალების ელექტრონებით დასახლება

ატომი	2s	2p _x	2p _y	2p _z
N ₇	1.51742	1.03800	1.06476	1.66474
N ₈	1.57229	1.24295	1.22075	1.23115



შერჩეული ლიგანდების კომპლექსწარმოქმნის უნარის შედარებისთვის ჩატარებულ იქნა ერთ-ერთი ფართოდ გამოყენებული d-მეტალის, ვერცხლის იონთან (Ag^+) მათი კომპლექსნაერთების (სქემა 4) გათვლები ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური მეთოდით AM1.



სქემა 4.

ელექტროდონორულ ატომებთან მეტალის ბმის რიგი (P_{E-M} , სადაც $E = O_7, N_8$ ან N_7, N_8 ; M^{n+} – მეტალის ატომია) განისაზღვრება შესაბამისი ჯგუფის ბუნებით. ასე მაგალითად, 2-ამინოფენოლის შემთხვევაში, ბმის რიგებია $P_{O_7-Ag_{16}} = 0.204808$ და $P_{N_8-Ag_{16}} = 0.437888$, ფარდობითი მუხტები კი – $q_7 = -0.251526$, $q_8 = -0.205519$ და $q_{16} = 0.616090$. 1,2-დიამინობენზოლის ბმის რიგებია $P_{N_7-Ag_{17}} = 0.359307$ და $P_{N_8-Ag_{17}} = 0.359125$, ფარდობითი მუხტები – $q_7 = -0.230596$, $q_8 = -0.230658$ და $q_{17} = 0.563703$, ხოლო მესამე შემთხვევაში (1,2-N,N'-დიმეთილამინობენზოლი) ბმის რიგებია $P_{N_7-Ag_{23}} = 0.351558$ და $P_{N_8-Ag_{23}} = 0.351718$, ფარდობითი მუხტები კი – $q_7 = -0.193119$, $q_8 = -0.193099$ და $q_{23} = 0.559172$. ამ მონაცემების გათვალისწინებით შეიძლება ვივარაუდოთ, რომ ვერცხლის იონთან V კომპლექსნაერთი უფრო მტკიცე იქნება, ვიდრე IV და VI (სქემა 4). V კომპლექსნაერთის VI-თან (სქემა 4) შედარებით მაღალი სიმტკიცე, როგორც ჩანს, განპირობებულია ამ უკანასკნელის მოლეკულაში აზოტის ატომებთან სტერიული ფაქტორის გაზრდით (აზოტთან, წყალბადის ატომის ნაცვლად, დაკავშირებულია უფრო დიდი მოცულობის მეთილის ჯგუფები).

2-ამინოფენოლის, 1,2-დიამინობენზოლისა და 1,2-N,N'-დიმეთილამინობენზოლის სავარაუდო ბიოლოგიური აქტიურობის შეფასების მიზნით ჩატარებული იქნა ვირტუალური ბიოსკრინინგი ინტერნეტ-სისტემის პროგრამით PASS C&T [10], რომელიც მაღალი სიზუსტით პროგნოზირებს ნაერთის შესაძლო ბიოლოგიურ აქტიურობას, კერძოდ, მოსალოდნელ ფარმაკოლოგიურ ეფექტებს, მუტაგენობას, კანცეროგენურობას, ემბრიოტოქსიკურობას და სხვ. პროგნოზი ხორციელდება ნაერთების სტრუქტურული ფორმულის საფუძველზე და ეფუძნება ცოდნის იმ ბაზას, რომელიც არსებობს ცნობილი ბიოაქტიური ნაერთების სტრუქტურის და მათი ბიოლოგიური აქტიურობის შესახებ. ნაერთების აქტიურობის ალბათობის შეფასება ხორციელდება P_a (აქტიური) და P_i (არააქტიური) პარამეტრებით. როდესაც $P_a > 0.5$, შესაბამისი ნაერთი, სავარაუდოდ, ექსპერიმენტულადაც გამოავლენს აქტიურობას და შესაძლოა, ამ კუთხით, ცნობილი ფარმაცევტული პრეპარატების ანალოგიც აღმოჩნდეს.

ზემოაღნიშნული ვირტუალური ბიოსკრინინგით მიღებული შედეგების ანალიზიდან გამომდინარე, შერჩეულ ლიგანდებს (I-III), ექსპერიმენტულად მაღალი ალბათობით ($P_a = 0.53-0.90$) (ცხრილი 8), შესაძლოა აღმოაჩნდეთ შემდეგი ტიპის ბიოლოგიური აქტიურობა: *Antibacterial (Antiviral, Antiprotozoal, Subtilisin inhibitor, Non mutagenic Salmonella), Antiparasitic (Antiprotozoal- Toxoplasma, Trypanosoma), Antiseborrheic, Anticarcinogenic* და სხვ.

ცხრილი 8. აზოტმემცველი ლიგანდების (I-III) შედარებითი ბიოლოგიური აქტიურობა

№	Antibacterial				Antiparasitic			Antiseborrheic	Anticarcinogenic	Antineurotoxic	Antianemic	Alzheimer's disease treatment
	Antiviral (Arbovirus)	Antiviral (Picornavirus)	Non mutagenic, Salmonella	Antibacterial activity enhancer	Antiprotozoal (Toxoplasma)	Antiprotozoal (Trypanosoma)	Anthelmintic (Nematodes)					
	P _a / P _i											
I	0.726	0.629	0.824	0.641	0.679	0.614	0.518	0.849	0.530	0.563	0.539	0.552
	0.022	0.025	0.015	0.034	0.042	0.008	0.040	0.028	0.049	0.078	0.058	0.035
II	0.789	0.697	0.700	0.677	0.841	0.636	0.536	0.817	0.547	0.705	0.559	0.553
	0.005	0.009	0.032	0.016	0.013	0.006	0.033	0.044	0.041	0.032	0.048	0.035
III	0.728	0.643	0.529	0.690	0.584	0.568	0.599	0.608	0.559	0.715	0.549	0.649
	0.021	0.020	0.058	0.012	0.065	0.016	0.015	0.123	0.035	0.029	0.053	0.007

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Hamid Khanmohammadi, Maryam Darvishpour. New azo ligands containing azomethine groups in the pyridazine-based chain: Synthesis and characterization. Chemistry, Inorganic Chemistry Papers. Dyes Pigm., 2009, 81, 3, 167-173.
2. N.C. Oforka, V.N. Mkpenie†. A New Method of Synthesis of Azo Schiff Base Ligands with Azo and Azomethine Donors: Synthesis of N-4-Methoxy-benzylidene-2-(3-hydroxyphenylazo)-5-hydroxy-aniline and Its Nickel(II) Complex. Chinese Journal of Chemistry, 2007, 25, 6, 869-872.
3. Wolfgang Kaim, Natasa Doslik, Stephanie Frantz, Torsten Sixt, Matthias Wanner, Frank Baumann, Gert Denninger, Hans-Juergen Kummerer, Carole Duboc-Toia, Jan Fiedler, Stanislav Zalis. Azo compounds as electron acceptor or radical ligands in transitionmetal species: spectro-electrochemistry and high-field EPR studies of ruthenium, rhodium and copper complexes of 2,2'-azobis(5-chloropyrimidine). Journal of Molecular Structure, 2003, 656, 183-194.
4. G. Lekishvili, B. Arziani, Kh. Barbakadze, N. Lekishvili. Models of physical properties of some biologically active adamantane containing anylides and nitroanylides. Proceedings of the Georgian National Academy of Sciences, 2009, 35, 2, 171-174.
5. მ. სამხარაძე, მ. რუსია, რუს. გიგაური, ჯ. მეტრეველი, რ. გიგაური. ტეტრათიონთიონატების სინთეზი და გამოკვლევა. საქ. მეცნ. აკადემიის მაცნე. ქიმიის სერია, 1998, 24, 4, 34-38.
6. მ. სამხარაძე, ი. დიდბერიძე, გ. ყორანაშვილი მ. რუსია, რ. გიგაური. d-მეტალთა ტეტრა-თიონთიონატების(V) კოორდინაციული ნაერთები ეთილენდიამიდთან. სინთეზი და გამოკვლევა. საქართველოს ქიმიური ჟურნალი (Georgia Chemical Journal), 2004, 4, 2, 101.
7. M. Samkharadze, N. Lekishvili, M. Rusia, Kh. Barbakadze, N. Kakhidze, Z. Pachulia, R. Gigauri†. Novel bioactive coordination compounds some of d-metals and nitrogen-containing ligands. Oxid. Comm. (International Journal), 2012 (Submitted).
8. M.J.S. Dewar, E.G. Zoebisch, E.F. Healy, and J. J.P. Stewart. J. Am. Chem. Soc., 1985, 107.
9. N.L. Allinger Conformational analysis, 130. MM2. A hydrocarbon force field utilizing V1 and V2 torsional terms. J. Am. Chem. Soc., 1977, 99.
10. A.B. Sadim, A.A. Lagunin, D.A. Filiminov, V.V. Poroikov. Internet-System of Prognose of the Spectrum of Bioactivity of Chemical Compounds. Chem.-Farm. J., 2002, 36, 10, 21-26.

STUDY OF COMPLEX FORMING ABILITY AND OF THEORETICAL BIOACTIVITY OF SOME NITROGEN-CONTAINING DIFUNCTIONAL LIGANDS WITH d-METALS

Nodar Lekishvili, Maia Rusia, Zurab Pachulia, Khatuna Barbakadze, Ketevan Kokaia, Kristina Giorgadze, Maia Tsintsadze

Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Complex forming ability of nitrogen-containing difunctional ligands – 2-aminophenole, 1,2-diaminobenzene and 1,2-N,N'-dimethyldiaminobenzene with d-metals have been studied. By using semi empirical quantum-chemical AM1 method geometrical characteristics, effective charges on atoms and electronic density, electron occupation on atomic orbitals have been calculated. It was established that the chosen aminophenol and diamines behaved as cyclic-bidentate ligands and able to form coordination compounds with d-metals in the form of 5-member cycle. The virtual bioscreening of the ligands have been carried out.

ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБНОСТИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ И ВИРТУАЛЬНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НЕКОТОРЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ДИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЛИГАНДОВ С d-МЕТАЛЛАМИ

Н.Г.Лекишвили, М.Ш.Русия, З.В.Пачулия, Х.А.Барбакадзе, К.Т.Кокая, К.П.Гиоргадзе, М.Г.Цинцадзе

Тбилисский Государственный Университет им. И. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Изучена способность комплексообразования азотсодержащих дифункциональных лигандов – 2-аминофенола, 1,2-диаминобензола и 1,2-N,N'-диметилдиаминобензола с d-металлами. Полуэмпирическим квантово-химическим методом AM1 вычислены геометрические характеристики, эффективные заряды на атомах и электронная плотность, а также заселенность атомных орбиталей. Установлено, что вышеупомянутые аминофенол и диамины ведут себя как бидентатные лиганды и способны образовать с d-металлами координационные соединения с 5-членными циклами. Проведен виртуальный биоскрининг подобранных лигандов.

ქრომის, მოლიბდენისა და სილიციუმის ერთდროული ელექტროქიმიური აღდგენის შესაძლებლობის დადგენა იონური ნალღობიდან

მარინე ხუციშვილი, სერგო გასვიანი, ლია ლაბაზაძე, ნინო მაისურაძე, ცისანა გაბისონია

ი. ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
რ. აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი

კვლევის ვოლტამპერული მეთოდის გამოყენებით შესწავლილი იქნა დეპოლარიზატორების Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 და K_2SiF_6 ელექტროქიმიური ქცევა $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ფონური ნალღობიდან, როგორც ცალცალკე, ასევე მათი ერთობლივი თანაობისას ნალღობში. დადგენილი იქნა $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ელექტროქიმიური აღდგენის პირობები, რაც საშუალებას იძლევა განხორციელდეს სამკომპონენტური კომპოზიციური ფეხვნილის $\text{Cr}_x\text{Mo}_y\text{Si}_z$ ელექტროქიმიური სინთეზი

ორი ან სამი სხვადასხვა კომპონენტის შემცველი ნაერთების $M_x M_y Si$ მისაღებად იონური ნალღობებიდან ერთ-ერთ უძიდავრეს პირობას წარმოადგენს შემადგენელ კომპონენტთა ელექტროქიმიური აღდგენის პირობების შესწავლა შერჩეული ფონური ნალღობებიდან, რასაც საფუძვლად უდევს ძნელადღობადი ლითონების და არალითონების ელექტროაღდგენის მრავალელექტრონიანი პროცესები.

კვლევის მიზანს შეადგენდა $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ფონური ნალღობიდან ქრომის, მოლიბდენისა და სილიციუმის ელექტროქიმიური აღდგენის პირობების შესწავლა. ამისთვის შევარჩიეთ შემდეგი კომპონენტები: Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 და K_2SiF_6 მათი ფიზიკო-ქიმიური თვისებების გათვალისწინებით, კვლევის პროცესში გამოვიყენეთ კვლევის ვოლტამპერული მეთოდი და პოტენციოსტატიკური ელექტროლიზი.

I - V მახასიათებლების გადაღებისას გამოვიყენეთ სამელექტროდიანი ელექტროქიმიური უჯრედი. ელექტროლიზერში ტემპერატურა ფიქსირებული იყო 1023 -ზე.

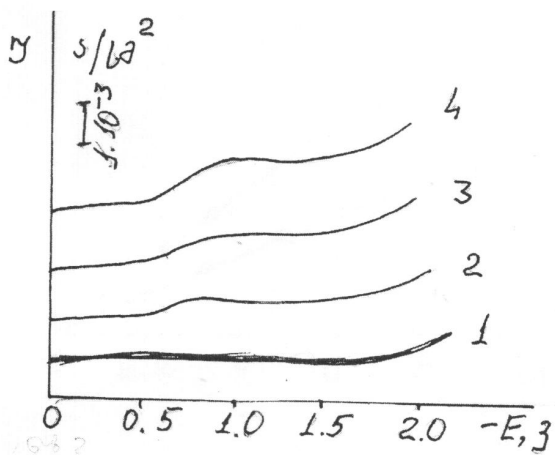
ქრომის, მოლიბდენისა და სილიციუმის თანაგამოლექვის მიზნით, შევისწავლეთ დეპოლარიზატორების: Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 და K_2SiF_6 -ის ელექტროაღდგენის ბუნება ქლორიდულ-ფტორიდული ნალღობიდან, მათი როგორც ცალ-ცალკე, ასევე ერთდროულად არსებობის პირობებში.

ნახ. 1-ზე წარმოდგენილია $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ფონურ ნალღობზე Na_2CrO_4 -ის დამატების შემდეგ მიღებული სურათი. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ქრომის ელექტროქიმიური აღდგენისას მხოლოდ ერთი ტალღა ფიქსირდება - (0,7 ± 0,9) ვოლტი პოტენციალის ზღვრებში. აღნიშნული ტალღის სიმაღლის თანდათანობით ზრდა განპირობებულია Na_2CrO_4 -ის კონცენტრაციის გაზრდით (მოლ/სმ³).

შემდეგ, მოლიბდენის ელექტროქიმიური აღდგენის შესწავლის მიზნით, $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ნალღობს დავამატეთ Na_2MoO_4 . ნახაზ 2-ზე მოტანილი ვოლტამპეროგრამებიდან ჩანს, რომ ტალღა ფიქსირდება - (0,7 ± 0,9) ვოლტ პოტენციალზე (კათოდი მინა-გრაფიტი). იმის გამო, რომ, სავარაუდოდ, შესაძლებელი იყო შენადნობის წარმოქმნა პლატინასა და მოლიბდენს შორის, პლატინის კათოდის ნაცვლად, აღებული გვექონდა მინა-გრაფიტის ღერო, რომლის დიამეტრიც ტოლია d=0,2 მმ.

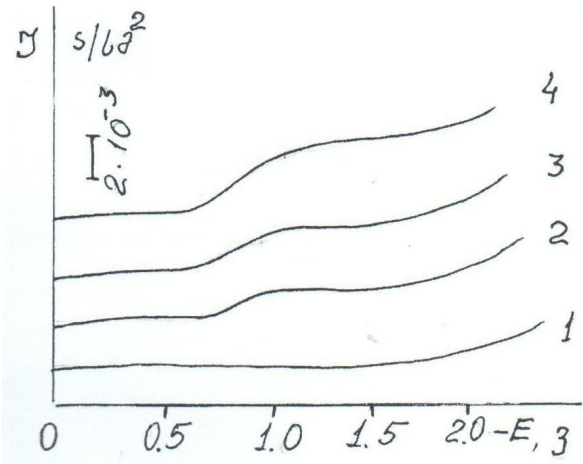
როგორც ექსპერიმენტიდან ჩანს, ქრომისა და მოლიბდენის აღდგენის პოტენციალები თანხვედნილია, ანუ ძვეს - (0,7 ± 0,9) ვოლტზე. პოტენციოსტატიკურ რეჟიმში ჩატარებულმა ელექტროლიზმა ცხადყო, რომ კათოდზე ხდებოდა ქრომისა და მოლიბდენის გამოყოფა ზემოაღნიშნულ პოტენციალთა ზღვრებში, რაც მიუთითებს იმაზე, რომ სავსებით შესაძლებელია ქრომისა და მოლიბდენის ერთდროული ელექტროქიმიური აღდგენა შერჩეული ნალღობიდან.

$\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ნალღობს, შემდგომი ექსპერიმენტისას, დავამატეთ K_2SiF_6 გარკვეული რაოდენობით მოლ/სმ³. ნახ. 3-ზე მოცემულია სილიციუმის ელექტროქიმიური აღდგენის სურათი. ამ შემთხვევაში ფიქსირებულია ერთი ტალღა - (1,4 ± 1,5) ვოლტზე, რაც განსხვავებულია ქრომისა და მოლიბდენის პოტენციალებისაგან. მაგრამ სხვა სურათი მიიღება Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 და K_2SiF_6 -ის ერთდროული თანაობისას $\text{NaCl} - \text{Na}_3\text{AlF}_6$ ნალღობში.



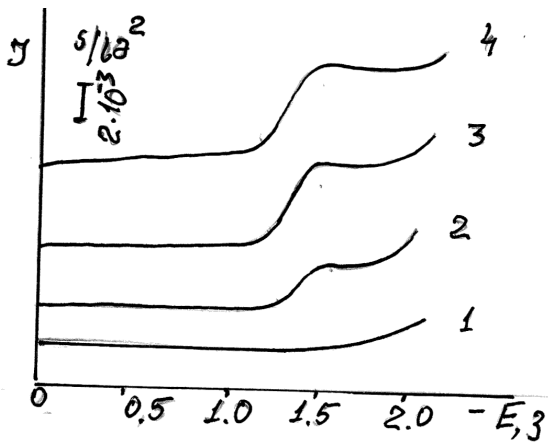
ნახ. 1. ვოლტამპეროგრაფია

1. ფონი $NaCl - Na_3AlF_6$;
2. ფონი + $2 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4
3. ფონი + $2,4 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4
4. ფონი + $3 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4



ნახ. 2. ვოლტამპეროგრაფია

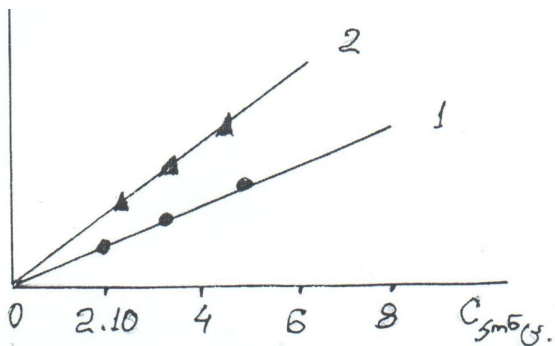
1. ფონი $NaCl - Na_3AlF_6$;
2. ფონი + $1,8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4
3. ფონი + $2,2 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4
4. ფონი + $2,8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4



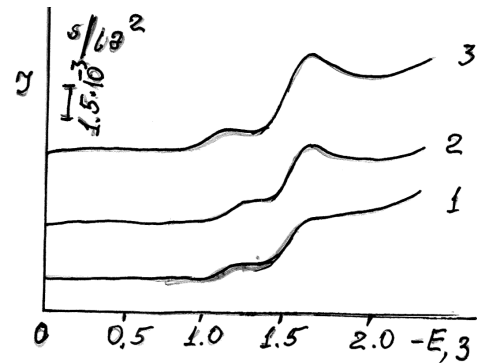
ნახ. 3. ვოლტამპეროგრაფია

1. ფონი $NaCl - Na_3AlF_6$;
2. ფონი + $3 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6
3. ფონი + $6 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6
4. ფონი + $8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6

ნახ. 4-ზე მოცემულია $I_{ზღ.}$ და $C_{კონც.}$ კონცენტრაციას შორის დამოკიდებულება ($C_{კონც.}$ არის ქრომისა და მოლიბდენის), რასაც აქვს სწორხაზობრივი სახე და კონტროლირდება დიფუზიით.



ნახ. 4. $C_{კონც.} Na_2CrO_4$ და $C_{კონც.} Na_2MoO_4$ კონცენტრაციების და ზღვრულ დენს შორის დამოკიდებულება - $T = 1023 K$; $V = 0,1$ ვ/წმ



ნახ. 5. ვოლტამპეროგრაფია

1. ფონი $NaCl - Na_3AlF_6$; + $2 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4 + $1,8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4 + $3 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6
2. ფონი + $2,4 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4 + $2,2 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4 + $6 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6
3. ფონი + $3 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2CrO_4 + $2,8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ Na_2MoO_4 + $8 \cdot 10^{-5}$ მოლ/სმ³ K_2SiF_6

ნახ. 5-ზე არსებული ვოლტამპეროგრამები გვიჩვენებენ, რომ ფონურ ნალღობში: $NaCl - Na_3AlF_6 - Na_2CrO_4 - Na_2MoO_4$ კალიუმის ფტორსილიკატის K_2SiF_6 დამატების შემდეგ, ქრომისა და მოლიბდენის აღდგენის პოტენციალებმა მკვეთრად გადაიწია მარჯვნივ, უფრო ელექტროუარყოფითი პოტენციალისაკენ – $E_1 = - (1,1 \text{ --} 1,2)$ ვოლტზე. E_1 პოტენციალის გადაწევა მარჯვნივ, აისახება CrO_4^{2-} ; MoO_4^{2-} ; SiF_6^{2-} -ის იონების ურთიერთგავლენით, რის საფუძველზეც შესაძლოა ადგილი ჰქონდეს მათ შორის რთული ასოციატის წარმოქმნას და შემდეგ ამ ასოციატის ელექტროაღდგენას. აღსანიშნავია, რომ ნალღობში K_2SiF_6 -ის კონცენტრაციის შემდგომი გაზრდით, იზრდება მხოლოდ მეორე ტალღის სიმაღლე $E_2 = - (1,4 \text{ --} 1,5)$ ვოლტზე რაც სავარაუდოდ, უნდა შეესაბამებოდეს ამ პოტენციალთა ზღვრებში **Cr**, **Mo**, **Si**-ის ერთობლივ განმუხტვას. პოტენციო-სტატიკურ რეჟიმში ჩატარებული ელექტროლიზის შედეგად, კათოდზე გამოიყოფა $Cr_x Mo_y Si_z$ შემადგენლობის პროდუქტი. ეს კი შესაძლებელს ხდის შემდგომი კვლევების საფუძველზე ელექტროქიმიური გზით იონური ნალღობებიდან მიღებულ იქნეს სამკომპონენტიანი შედგენილობის კომპოზიციური ფუნქციონალი – $Cr_x Mo_y Si_z$.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Барабошкин А.Н. Электрокристаллизация металлов из расплавленных солей. Москва: Наука, 1972, с. 280.
2. Кушхов Х. Б., Малышев В.В., Шаповал В.И. и др. Электровосстановление кремния (IV) на фоне расплава $NaCl - Na_3AlF_6$. Укр. хим. Ж., 1991, т. 57, №10, с. 1097-1100.
3. Васьюко А.Т., Ковач С. К. Электрохимия тугоплавких металлов, Киев: Техника, 1983.

ESTABLISHMENT OF POSSIBILITY OF ELECTROCHEMICAL REPAIRS OF CHROMIUM, MOLYBDENUM, AND SILICON FROM THEIR IONIC MELTS AT JOINT PRESENCE

Marine Khutsishvili, Sergo Gasviani, Lia Abazadze, Nino Maisuradze, Tsisana Gabisonia
Rafiel Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry
of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Electrochemical behavior of depolarizers Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 and K_2SiF_6 has been studied by voltammetric method at the background of melt of $NaCl - Na_3AlF_6$, separately as well as at their joint presence in the melt. Are established parameters the electrochemical reductions potentials of **Cr**, **Mo**, **Si**. Became possible as a result the electrochemical syntheses composite powders $Cr_x Mo_y Si_z$.

УСТАНОВЛЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ХРОМА, МОЛИБДЕНА И КРЕМНИЯ ИЗ ИОННЫХ РАСПЛАВОВ

М.Ш.Хуцишвили, С.Г.Гасвиани, Л.М.Абазадзе, Н.Г.Маисурадзе, Ц.Д.Габисония
Институт неорганической химии и электрохимии им.Р.И. Агладзе
Тбилисского Государственного Университета им. И. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Методом вольтамперных исследований было изучено электрохимическое поведение деполаризаторов Na_2CrO_4 , Na_2MoO_4 и K_2SiF_6 на фоне расплава $NaCl - Na_3AlF_6$ в период их нахождения в расплаве как совместно, так и в отдельности. Установлены условия электрохимического восстановления **Cr**, **Mo**, **Si**, которое дают возможность осуществления электрохимического синтеза трехкомпонентного композиционного порошка $Cr_x Mo_y Si_z$.

АНОДНЫЕ ПЛЁНКИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ЖЕЛЕЗОМ ДИОКСИДА МАРГАНЦА
ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Г.А.Цагарели, Ш.М.Махатадзе, Н.Г.Майсурадзе, Л.Г.Бацанадзе, А.Г.Шакаришвили,

*Тбилисский государственный университет им.Иване Джавахишвили
Институт неорганической химии и электрохимии им.Р.И.Агладзе*

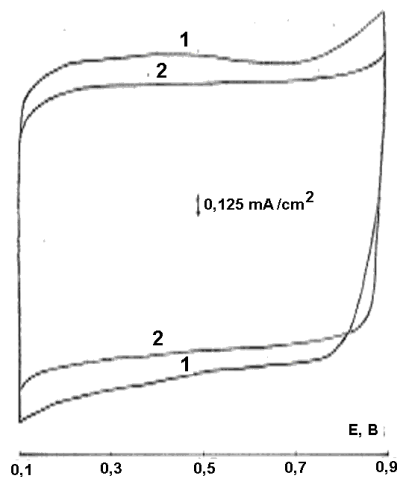
Плѐнки диоксида марганца (ДМ), полученные из растворов электролита, содержащего ионы железа, были изучены методом циклической вольтамперометрии. Внедрение ионов железа в структуру ДМ улучшает форму циклических вольтамперограмм, увеличивает ёмкость плѐнки и степень циклирования. Показано, что электрохимическая реакция протекает не на поверхности плѐнки, а в её объѐме. Плѐнки диоксида марганца, полученные этим методом, можно считать перспективным материалом для суперконденсаторов.

Ли и Гуденов впервые показали, что порошок аморфного диоксида марганца (ДМ), введѐнный в структуру композитного электрода, проявляет электрохимические свойства, сходные с поведением обычных электростатических конденсаторов [1]. После этой публикации интерес к ДМ как к активному материалу для суперконденсаторов (СК), быстро растѐт с каждым годом [2-4]. ДМ представляет собой нестехиометрическое соединение со множеством модификаций, различающихся кристаллической структурой или аморфностью, размером зѐрен, наличием примесных ионов, присутствием структурной или адсорбированной воды, существованием вакансий и т.д. Структурные различия определяют свойства ДМ, в том числе электродные. Таким образом, целенаправленно меняя условия синтеза ДМ, возможно получение материала с нужными электрохимическими свойствами. Для СК используется псевдоѐмкость тонкой плѐнки, например оксида переходного металла, обусловленная быстрой, обратимо протекающей окислительно-восстановительной электрохимической реакцией за сѐт образования различных окисленных состояний активного материала [2,5]. Активная плѐнка должна отличаться механической и химической стойкостью и не разрушаться в достаточно широком интервале рабочих потенциалов и многократном циклировании.

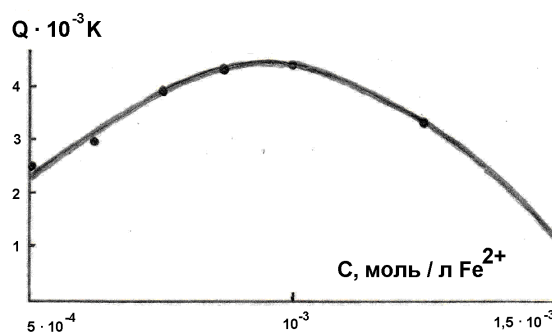
В нашей работе тонкие плѐнки активного материала получали анодным осаждением ДМ на платиновой проволоке диаметром 1 мм из растворов, содержащих $2 \cdot 10^{-3}$ моль/л $MnSO_4 + 0,195$ моль/л $Na_2SO_4 + 5 \cdot 10^{-3}$ моль/л H_2SO_4 в присутствии сульфата железа при потенциале 1,2 В относительно хлорсеребряного электрода. Выбор железа в качестве модифицирующего агента предопределили ранее полученные результаты. Было показано, что при наличии ионов железа в растворе электролита в структуру осаждающегося на аноде ДМ внедряется железо. Полученная при этом модификация ДМ резко меняла электродные свойства, увеличивалась поляризация электрода и при достижении 5% железа в ДМ дальнейшее его осаждение прекращалось [6]. ДМ характеризуется полупроводниковыми свойствами, поэтому такое сильное влияние примесного железа на электродные характеристики ДМ вполне объяснимо. Свойства полученных плѐнок изучали методом циклической вольтамперометрии в стандартной трёхэлектродной ячейке. Вспомогательным электродом служила платиновая пластинка, а электродом сравнения – хлорсеребрянный электрод. Циклические вольтамперограммы снимали в растворе 0,5 моль/л Na_2SO_4 , скорость развѐртки потенциала равнялась 50 мВ/с, диапазон циклирования – 0,1В-0,9В. Ёмкость плѐнки рассчитывали по формуле

$$C = \frac{I \cdot \Delta t}{\Delta V \cdot S} \quad (1)$$

где I – сила тока, t – время развѐртки в одну сторону, ΔV – интервал развѐртки потенциала, S – площадь видимой поверхности электрода. $I \cdot \Delta t$ определяли из половины площади, описываемой циклической вольтамперограммой. Удельную ёмкость рассчитывали на единицу площади видимой поверхности электрода, а не на единицу массы плѐнки, так как выход по току ДМ в присутствии железа в растворе электролита существенно меньше 100%, и рассчитать массу продукта по количеству эклектричества, затраченного на осаждение ДМ не представлялось возможным.



რის. 1. Циклические вольтамперограммы плёнки ДМ, модифицированного железом в растворе 0,5 моль/л Na_2SO_4 , скорость развёртки потенциала 50 мВ/с: 1 – третий цикл; 2 – 500-ый цикл. Плёнка ДМ получена в растворе $2 \cdot 10^{-3}$ моль/л $\text{MnSO}_4 + 0,195$ моль/л $\text{Na}_2\text{SO}_4 + 5 \cdot 10^{-3}$ моль/л $\text{H}_2\text{SO}_4 + 10^{-3}$ моль/л FeSO_4 при потенциале 1,2 В относительно Ag/AgCl электрода сравнения; на формирование плёнки затрачено $3 \cdot 10^{-2}$ К электричества



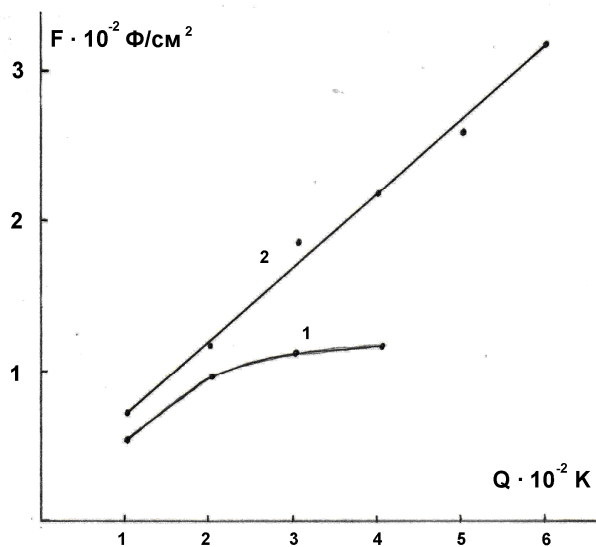
რის. 2. Влияние концентрации ионов железа в растворе для получения плёнки ДМ на её ёмкость; остальные условия те же, что на рис.1

На рисунке 1 показана циклическая вольтамперограмма плёнки ДМ допированного железом. Ёмкость, рассчитанная по формуле (1) равняется $1,9 \cdot 10^{-2}$ Ф/см². Внедрение ионов железа в кристаллическую решётку ДМ увеличивает ёмкость плёнки и существенно улучшает вид кривой, который приближается к идеальной для СК прямоугольной форме. Влияние концентрации ионов железа в растворе электролита для получения плёнок ДМ на её ёмкость показано на рисунке 2. Из рисунка видно, что оптимальной концентрацией можно считать приблизительно 10^{-3} моль/л Fe^{2+} . Именно при такой концентрации Fe^{2+} получена плёнка, циклическая вольтамперограмма которой приведена на рисунке 1. Кривая 1 на этом рисунке соответствует стабильно воспроизводимой циклической вольтамперограмме, начинающееся обычно с второго или третьего по порядку цикла. Кривая 2, рисунок 1 – 500-ый цикл по порядку. Как правило, уменьшение ёмкости после 500-го цикла лежит в интервале 10%-15%. Окислительно-восстановительную реакцию, протекающую при циклировании, можно представить уравнением

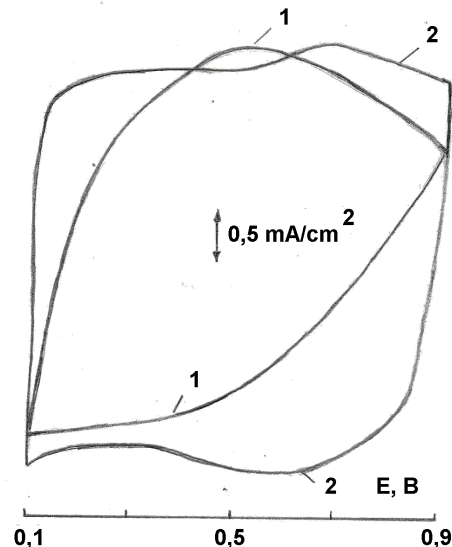


Поведением, сходным с работой электрических конденсаторов, отличаются лишь тонкие плёнки в несколько десятков и сотен нанометров, так как электропроводность ДМ не очень высокая и с увеличением толщины плёнки возрастает сопротивление. Кроме того, сказываются диффузионные ограничения протона в твёрдой фазе ДМ, как это следует из уравнения (2) [7]. На рисунке 3 показана зависимость ёмкости плёнки ДМ от количества электричества, затраченного на формирование плёнки, т.е. от её массы, а следовательно и толщины. Как видно из рисунка, при увеличении толщины плёнки ДМ, немодифицированного железом, начиная с не очень толстых плёнок, ёмкость перестаёт зависеть от массы ДМ, рисунок 3, кривая 1. Ёмкость же плёнки ДМ, модифицированного железом, прямопропорциональна её массе и достигает $4 \cdot 10^{-2}$ Ф/см², рисунок 3, кривая 2.

Из полученных результатов следует, что в изученных условиях окислительно-восстановительный процесс в случае ДМ, не содержащего железа, протекает вблизи поверхности электрода, тогда как при модификации ДМ железом “работает” весь объём плёнки. По всей видимости, внедрение железа в структуру ДМ увеличивает электропроводность плёнки, но самое главное, облегчает твёрдофазную диффузию протона в ней. Форма циклической вольтамперограммы, даже сравнительно толстой (порядка микрометров) плёнки ДМ, модифицированного железом, остаётся близкой к прямоугольной и симметричной, т.е. сохраняет свойства необходимые для электрохимического конденсатора. Форма же плёнки ДМ без железа в аналогичных условиях сильно искажена и несимметрична, рисунок 4.



რის. 3. Зависимость ёмкости плёнки от количества электричества, затраченного на электроосаждение плёнки ДМ: 1 – немодифицированный ДМ; 2 – модифицированный железом ДМ



რის. 4. Циклические вольтамперограммы плёнки ДМ; на формирование плёнки затрачено $6 \cdot 10^{-2}$ К электричества: 1 – немодифицированный ДМ; 2 – модифицированный железом ДМ

В заключении можно сказать, что внедрение ионов железа в структуру ДМ, существенно улучшает “конденсаторные” свойства его плёнок и, вероятно, может способствовать созданию приемлемого материала для СК.

ლიტერატურა - REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. H.Y. Lee and J.B. Goodenough, J. Solid State Chem., 1999, v.144, p.220.
2. Daniel Belanger, Thierry Brousse, and Jeffrey W. Long, Interface, 2008, v.17, p.49.
3. Francesco Lufrano and Pietro Staiti, Int. J. Electrochem. Sci., 2009, v.4, p.173.
4. F. Lufrano, P. Staiti, E.J. Juarez-Perez, J.A. Menendez, A. Arenillas, Int. J. Electrochem. Sci., 2011, v.6, p.596
5. Suh-Cem Pang, Marc A. Anderson, and Thomas W. Chapman, J. Electrochem. Soc., 2000, v.147, p.444.
6. Г.А. Цагарели, Н.Г. Майсурадзе, Л.И. Бацанадзе, А.Г. Шакаришвили, Ш.М. Махатадзе, Известия НАН Грузии, 2010, т.36, с.16.
7. Katsuhiko Naoi and Masayuki Morita, Interface, 2008, v.17, p.44.

რკინით მოდიფიცირებული მანგანუმის დიოქსიდის ფირები სუპერკონდენსატორებისათვის

გიორგი ცაგარელი, შოთა მახათაძე, ნინო მაისურაძე, ლიანა ბაცანაძე, ამალია შაკარიშვილი

ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რაფელ აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი

რეზიუმე

რკინის შემცველი ელექტროლიტის ხსნარებიდან ანოდურად მიღებული მანგანუმის დიოქსიდის თხელი ფირები შევისწავლეთ ციკლური ვოლტამპერომეტრიის მეთოდით. რკინის იონების ჩანერგვა მანგანუმის დიოქსიდის სტრუქტურაში აუმჯობესებს ციკლური ვოლტამპეროგრამების ფორმას, ზრდის ფირის ტევადობას და ციკლირების უნარს. ნაჩვენებია, რომ ელექტროქიმიური რეაქცია მიმდინარეობს არა ზედაპირზე, არამედ ფირის მოცულობაში. ამ მეთოდით მიღებული მანგანუმის დიოქსიდის ფირები შეიძლება ჩაითვალოს პერსპექტიულ მასალად სუპერკონდენსატორებისათვის.

ANODIC FILMS OF IRON-MODIFIED MANGANEZE DIOXIDE FOR SUPER CONDENSERS

Giorgi Tsagareli, Shota Makhatadze, Nino Maisuradze, Liana Batsanadze, Amalia Shacarishvili,

Ivane Javkhishvili Tbilisi State University

Rafael Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry

SUMMARY

Thin films of manganese dioxide, prepared anodically from the solutions of iron-containing electrolyte, were studied by the method of cyclic voltammetry. Introduction of iron ions in the structure of manganese dioxide improves the shape of cyclic voltammogram, increases a film capacity and cycling ability. It was shown that electrochemical reaction proceeds in film volume instead of a surface. The films of manganese dioxide, prepared by mentioned method, may be considered as promising material for super condensers.

4-ჰიდროქსიკუმარინისა და ქინოლინის ბირთვების შემცველი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების სინთეზი სამკომპონენტო რეაქციით

ნანა ჩაგანავა, შზია ციცავი, მირანდა ხაჩიძე, მარიამ ჩხაიძე, მანანა ბუზარიაშვილი

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

კუმარინების და მათი ნაწარმების სინთეზი და ფარმაკოლოგიური კვლევა დღესაც აქტუალურია, რადგან ეს ნაერთები ხასიათდებიან აქტიულობით ფართო სპექტრით. სინთეზირებული ნაწარმების უძრაველობა ბიოლოგიურად აქტიურია და ბევრი მათგანი თერაპიაში გამოიყენება. მეორე მხრივ, ქინოლინის ნაწარმები ამჟღავნებენ ანთების საწინააღმდეგო, ანტიმიკრობულ, ანტიბაქტერიულ, ანტიკანცეროგენულ, ანტიმალარიულ აქტივობას. სინთეზირებულია ორი ახალი ნაერთი სამკომპონენტო რეაქციის გამოყენებით ძმარმევა არეში 4-ჰიდროქსიკუმარინის, სალიცილის ალდეჰიდის და ქინოლინის/იზოქინოლინის ურთიერთქმედებით. ყველა მიღებული ნაერთი მდგრადია ბიოლოგიურ აქტივობაზე ტესტირებისთვის.

ბუნებრივი და სინთეზური კუმარინები და მათი წარმოებულები გამოირჩევიან განსაკუთრებული რეაქციისუნარიანობით და ბიოაქტივობით, რაც განაპირობებს კუმარინის ბირთვის შემცველი ახალი ნივთიერების სინთეზისადმი მაღალ ინტერესს.

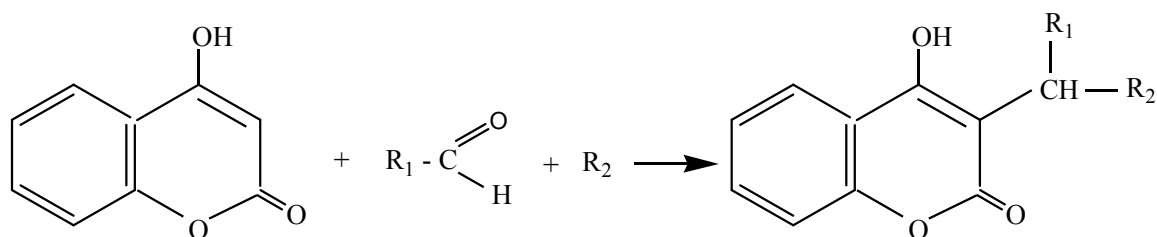
კუმარინის წარმოებულების უმეტესობა ამჟღავნებს ფარმაკოლოგიურ აქტივობას და გამოიყენება თერაპიაში ანტიკოაგულანტურ, ანტიბაქტერიულ და ანტიფუნგიციდურ აგენტებად. უკანასკნელ წლებში კუმარინების მიმართ ინტერესი გაიზარდა, რადგან როგორც აღმოჩნდა, ზოგიერთი წარმოებული ამცირებს ადამიანის იმუნოდეფიციტის ვირუსის (AIV) აქტივობას, ამასთან ციტოსტატიკური აქტივობის გამო შესაძლებელია მათი გამოყენება სიმსივნის საწინააღმდეგო თერაპიაში [1-4].

თავის მხრივ, ქინოლინის, როგორც ბუნებრივი, ასევე სინთეზური წარმოებულები დიდი ხანია გამოიყენება სხვადასხვა დაავადებების სამკურნალოდ. ისინი ხასიათდებიან ანთების საწინააღმდეგო, ანტიმიკრობული, ანტიბაქტერიული, მალარიისა და სიმსივნის საწინააღმდეგო აქტივობებით. ეს უკანასკნელი განპირობებულია მათი ინტერკალაციით დნმ-ის ფუძე წყვილებს შორის და ხელს უწყობს ენზიმ ტოპოიზომერაზა II-ის მოქმედებას, რომელიც თავის მხრივ ჩართულია დნმ-ს გაწყვეტის პროცესში. [5;6]

ჩვენს მიზანს წარმოადგენდა სამკომპონენტო რეაქციით შესაძლო ბიოლოგიური აქტივობის მქონე ისეთი ჰეტეროციკლური ნაერთების სერიის შექმნა, რომლებიც შეიცავენ როგორც 4-ჰიდროქსიკუმარინის, ასევე ქინოლინის ან იზოქინოლინის ბირთვებს. ალდეჰიდი ამ რეაქციის ის კომპონენტია, რომლის ცვლილება საშუალებას იძლევა სხვადასხვა ფუნქციონალური ჯგუფების შეყვანით მოხდეს როგორც ბიოაქტივობის, ასევე ხსნადობის კონტროლი. ჩვენს მიერ სინთეზირებული იქნა:

- 3-(4-ჰიდროქსიკუმარინილ)-5'-ქინოლილ-4''-ჰიდროქსი-3'''-მეთოქსიფენილმეთინი(III);
- 3-(4-ჰიდროქსიკუმარინილ)-5'-იზოქინოლილ-4''-ჰიდროქსი-3'''-მეთოქსიფენილმეთინი (IV);
- 3-(4-ჰიდროქსიკუმარინილ)-5'-ქინოლილ-ფენილმეთინი(V);
- 3-(4-ჰიდროქსიკუმარინილ)-5'-იზოქინოლილ-მეთოქსიფენილმეთინი(VI).

მიღებული ნივთიერებები მდგრადია, რაც საშუალებას იძლევა ჩატარდეს მათი ტესტირება ბიოლოგიურ აქტივობებზე. [7].



VII-VIII

R₁ - II- სალიცილის ალდეჰიდი

R₂ - Ia - ქინოლინი; Ib - იზოქინოლინი

ვინაიდან ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების ტესტირებისთვის მნიშვნელოვანია მათი წყალში ხსნადობა, მიზნობრივი პროლეუქტის ხსნადობის გასაზრდელად საინტერესო იყო სამკომპონენტთან სინთეზში ალდეჰიდად სალიცილის ალდეჰიდის გამოყენება, მის სტრუქტურაში ჰიდროქსილის ჯგუფის არსებობის გამო.

სინთეზი განხორციელდა 4-ჰიდროქსიკუმარინის კონდენსაციით ქინოლინთან (Ia) და იზოქინოლინთან (Ib). ალდეჰიდად გამოყენებული იქნა სალიცილის ალდეჰიდი(II). რეაქცია ტარდებოდა 55-60⁰C-ზე. ტემპერატურის გაზრდა მნიშვნელოვნად არ ცვლიდა მიზნობრივი პროლეუქტების გამოსავალს. მიღებულია ნივთიერებები 3-(4-ჰიდროქსიკუმარილ)-5'-ქინოლილ-მეთილფენილმეთინი (VII); 3-(4-ჰიდროქსიკუმარილ)-5'-იზოქინოლილ-მეთილფენილმეთინი (VIII), რომლებიც მდგრადია, რაც საშუალებას იძლევა ჩატარდეს მათი ტესტირება ბიოლოგიურ აქტივობებზე.

ექსპერიმენტული ნაწილი

ნარეკს, რომელიც შეიცავს 0,00025 მოლ 4-ჰიდროქსიკუმარინს, 0,00025 მოლ (Ia ან Ib)-ს და 0,0004 მოლ სალიცილის ალდეჰიდს (II), უმატებენ 3 მლ ყინულოვან ძმარმჟავას, ურევენ 55-60⁰C-ზე 10სთ-ის განმავლობაში. რეაქციის პროლეუქტს ასხამენ ყინულზე, უმატებენ 10%-იან NaOH-ს pH-7-მდე, გამოყოფილ თეთრ ნალექს რეცხავენ გამოხდილი წყლით. მიღებულ პროლეუქტს ასუფთავებენ გადაკრისტალებით მეთანოლიდან. ტლ. (VII) 115-116⁰C; (VIII) 130-132⁰C. ი.წ. სპექტრი 470; 678; 1110; 1280; 1380; 1457; 1612სმ⁻¹ (VIII) 477; 678; 1110; 1280; 1380; 1643 სმ⁻¹.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Jae-Chul Jung, Ji-Ho Lee, Seikwan Oh, Jae-Gon Lee and Oee-Sook Park. Synthesis and antitumor activity of 4-Hydroxycoumarin derivatives. Bioorganic&Medicinal Chemistry Letters, 2004, 14, p.5527-5531
2. M.A.Al-Haisa, M.S.Mostafa and M.Y.El-Kady. Synthesis and Biological Evaluation of SOME New Coumarine Derivatives. Molecules 2003, 8, p.275-286.
3. Davorska Zarvsnik, Samija Muratovic, Selma Spirtovic, Dzenita Softic, Marica Medic-Saric. Bosnian Journal Of Basic Medical Sciences 2008, 8(3), 28p.277-281.
4. M.A.Al-Haisa, M.S.Mostafa and M.Y.El-Kady. Preparation of Some New Coumarin Derivatives with Biological Activity. Scientific Journal of King Faisal University(Baisic and Applied Sciences) 2005, Vol.6 №1 p.75-94
5. Luo Zai-gang, Zeng Cheng-chu, Wang Fang. Synthesis and biological activities of quinoline derivatives as HIV-1 integrase inhibitors. Chem . Res. Chinese Universities 2009, 25(6), 841-845
6. Piyush Bihari Lal, Naresh kumar, Tasleem arif, T.K mandal. in vitro anti-bacterial activity of a novel isoquinoline derivative and its post antibacterial effects on pseudomonas aeruginosa. African Journal of Microbiology Research. vol. (2)pp. 126-130, may 2008
4. 5. ჩაგანავა, მ. ციცაგი, მ. საჩიძე, მ. ჩხაიძე, მ. ბუზარიაშვილი, 4-ჰიდროქსიკუმარინის ანოტომეტიკული ჰეტეროციკლური წარმოებულების სინთეზი. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია 2012 ტ.38 №3 გვ.139-140.

**SYNTHESIS OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS CONTAINING
4-HYDROXYCOUMARIN AND QUINOLIN BY THREE-COMPONENT REACTION**

N.Chaganava, M.Tsitsagi, M.Khachidze, M.Chkhaidze, M.Buzariashvili

*Ivane Javakhishvili Tbilisi State University,
Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry***SUMMARY**

Synthesis and pharmacological investigation of coumarins and their derivatives are still actual, because these compounds have shown broad spectra of activity. A great number of synthesized derivative are biologically active, and many of them are applied in therapy. On the other hand derivatives of quinolin have been studied for the different biological activity such as antimicrobial, anti-inflammatory, anticarcinogenic, antimalarial activities. Two new compounds were synthesized by using a three component reaction with 4-hydroxycoumarin, salicylic aldehyde and quinolin, isoquinolin in acetic acid. All received compounds are stable for biological activity testing.

**СИНТЕЗ СОДЕРЖАЩИХ 4-ГИДРОКСИКУМАРИНОВЫЕ И ХИНОЛИНОВЫЕ
ЦИКЛЫ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ РЕАКЦИЕЙ**

Н.Т. Чаганова, М.В. Цицаги, М.М. Хачидзе, М.Ш. Чхаидзе, М.С. Бузариашвили

*Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили
Институт физической и органической химии им. П.Г. Меликишвили***РЕЗЮМЕ**

Синтез и фармакологическое исследование кумарина и его производных до сих пор актуальны, так как эти соединения показывают широкий спектр биоактивности. Большинство синтезированных соединений биологически активны и многие из них употребляются в терапии. С другой стороны, производные хинолина характеризуются противовоспалительной, антимикробной, антибактериальной, антиканцерогенной и антималярийной активностью. Синтезированы два новых соединения с использованием трехкомпонентной реакции взаимодействием 4-гидроксикумарина, салицилового ангидрида и хинолина/изохинолина в уксусной кислоте методом трехкомпонентной реакции. Все полученные соединения стабильны для исследования их биологической активности.

მეთანის აღსორბციის შესწავლა ბუნებრივ მოდიფიცირებულ ცეოლითებზე

ელიზავეტა ცხაკაია, რუსუდან ხოსიტაშვილი
 ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
 რაფიელ აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი

შესწავლილია მეთანის აღსორბცია ბუნებრივ მოდიფიცირებულ ცეოლითებზე. გამოთვლილი იქნა თითოეული ცეოლითისათვის მოცულობითი ტევადობა მეთანის მიმართ. დადგენილია, რომ მოცემული ცეოლითებიდან მეთანი ყველაზე კარგად აღსორბირებს ხეკორძულას HNaX -ით, ხოლო შედარებით ნაკლებად ხეკორძულას Ni -ით მოდიფიცირებულ კლინოპტილოლითზე.

წარსული და მიმდინარე ემისიები მავნე ნივთიერებებისა, როგორცაა მეთანი, წარმოადგენს 21-ე საუკუნის გლობალურ-კლიმატური ცვლილების საფრთხეს.

მეთანი წარმოადგენს შავი ზღვის ეკოსისტემის მნიშვნელოვან ელემენტს, რომელიც გავლენას ახდენს კლიმატის გლობალურ ცვლილებაზე. შავი ზღვის ფსკერზე არსებული ვულკანები, გეოლოგიური ბზარები ამარაგებენ ზღვას მეთანით და გოგირდწყალბადით. ზღვის წყლის ტემპერატურის ზრდამ შეიძლება გამოიწვიოს გაზოჰიდრატების დაშლა და დიდი რაოდენობით მეთანის გამოყოფა, რაც იწვევს ატმოსფერული ჰაერის დაბინძურების ზრდას და შესაბამისად გავლენას ახდენს კლიმატის გლობალურ ცვლილებაზე, რადგან მეთანის სათბურის პოტენციალი 21-ჯერ უფრო მაღალია ვიდრე ნახშირორჟანგის.

აღნიშნულ პრობლემას ეძღვნება მრავალი სამუშაო [5-6], რომლებშიც აღწერილია მეთანისა და სხვა სასარგებლო კომპონენტების ამოღების მეთოდები.

დღეისათვის აირადი სისტემების გასუფთავების მეთოდებს შორის განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭება აღსორბციულ მეთოდებს, რადგან მხოლოდ აღსორბენტებს შეუძლიათ მინარევების პრაქტიკულად მთლიანად დაჭერა და რამდენიმე კომპონენტისგან გასუფთავება. ისინი ხასიათდებიან შთანთქმის შედარებით მაღალი სელექტურობით ატმოსფერული ჰაერის დამაბინძურებელი ნივთიერებების მიმართ [7].

ცეოლითებმა ანუ მოლეკულურმა ალუმინსილიკატურმა საცრებმა ($\text{Me}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 10\text{SiO}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) თავიანთი კრისტალური სტრუქტურის გამო, როგორც ეფექტურმა აღსორბენტებმა ჰპოვეს ფართო გამოყენება. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ საქართველო მდიდარია დანალექი წარმოშობის ბუნებრივი ცეოლითებით. ისინი აღწევენ გაწმენდის ისეთ ხარისხს, რომელიც აკმაყოფილებს თანამედროვე სანიტარულ მოთხოვნებს [2-7].

ადგილობრივ ბუნებრივ ცეოლითებს აქვთ შერჩევითი სორბციული უნარი. ცეოლითური ფილტრების გამოყენების შესაძლებლობას მათი მკვეთრად გამოხატული ფორიანობა და ჰიდროდინამიკური თვისებები განაპირობებს.

ლიტერატურული მონაცემებით ცნობილია, რომ მეთანი კარგად აღსორბირებს სინთეზურ ცეოლითებზე (NaX , CaA , CaX და სხვა) [3], ასევე ცნობილია, რომ ბუნებრივ კლინოპტილოლითზე (ძეგვის) ნახშირწყალბადები C_1 და ზემოთ პრაქტიკულად არ აღსორბირებენ [1].

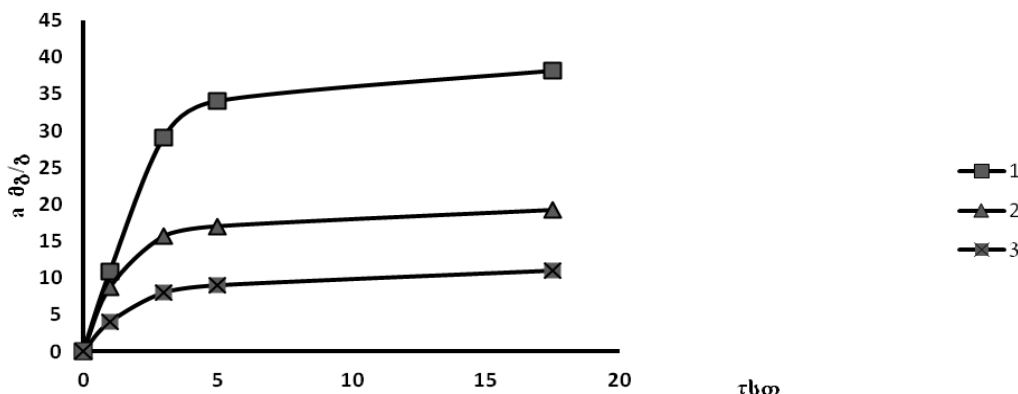
ჩვენს მიერ შესწავლილ იქნა მეთანის აღსორბცია სხვადასხვა მოდიფიცირებულ კლინოპტილოლითზე. დადგენილ იქნა, რომ მეთანი პრაქტიკულად არ აღსორბირებს გამოუმშრობ ცეოლითებზე. ამიტომ, მეთანის აღსორბციის შესწავლა ხორციელდებოდა გამომშრალ ცეოლითებზე.

ცხრილში 1 და ნახაზზე 1 მოცემულია კლინოპტილოლითზე აღსორბირებული მეთანის რაოდენობის დამოკიდებულება დაყოვნების დროზე.

როგორც მიღებული შედეგებიდან ჩანს, გამოცდილი ცეოლითებიდან მეთანი ყველაზე კარგად აღსორბირებს ხეკორძულას HNaX -ით, ხოლო შედარებით ნაკლებად ხეკორძულას Ni -ით მოდიფიცირებულ კლინოპტილოლითზე. ჩვენს მიერ ადრე ჩატარებულ სამუშაოში [4] შესწავლილი იქნა აგრეთვე H_2S -ის აღსორბცია ზემოაღნიშნულ ცეოლითებზე. ამ კვლევამ აჩვენა, რომ H_2S ყველაზე კარგად აღსორბირებს Ni -ით მოდიფიცირებულ კლინოპტილოლითზე. ამრიგად, ექსპერიმენტის შედეგად შეიძლება დავასკვნათ, რომ შესწავლილი ცეოლითები ხასიათდებიან სელექტიურობით გოგირდწყალბადისა და მეთანის მიმართ, რაც შეიძლება გამოყენებული იქნას ამ აირების დასაცილებლად.

ცხრილი 1. CH₄-ის ადსორბციის (a მგ/გ – მოცულობითი ტევადობა) კინეტიკა ცეოლითებზე t=25°C (საწყისი პირობები V=1ლ, P=760 მმ.ვ.სვ.)

კლინოპტილოლითი	τ, სთ			
	1	3	5	18
ხეკორძულას Ni-ით მოდიფიცირებული	8.00	9.00	9.50	10.99
ხეკორძულას 2N HCl-ით მოდიფიცირებული	8.73	15.65	17.06	19.21
ხეკორძულას HNaX-ით მოდიფიცირებული	10.89	29.04	35.10	38.11



ნახ. 1. CH₄-ის ადსორბციის (a მგ/გ) კინეტიკა ცეოლითებზე t=25°C

1. ხეკორძულას HNaX-ით მოდიფიცირებული კლინოპტილოლითი;
2. ხეკორძულას 2N HCl-ით მოდიფიცირებული კლინოპტილოლითი;
3. ხეკორძულას Ni-ით მოდიფიცირებული კლინოპტილოლითი.

სამუშაო შესრულდა ახალგაზრდა მეცნიერთათვის პრეზიდენტის სამეცნიერო გრანტის ფარგლებში, რისთვისაც მადლობას ვუხდით შოთა რუსთაველის ეროვნულ სამეცნიერო ფონდს.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Г.Сихарулидзе, М.С.Мерабишвили, Ц.Г.Доленджишвили, Г.К.Хубулава. Исследование извлечения из газовых смесей кислых компонентов природным клиноптилолитом. «Клиноптилолит», Тбилиси, 1977.
2. Е.М.Бенашвили. Разделение углеводородных и гетероатомных соединений нефти. Тбилиси, «Мецნიერება», 1987, 150 с.
3. skatz.ru/uploads/static/6/zeolites.pdf.
4. ე.ცხაკაია, თ.მარსაგიშვილი, ნ.ანანიაშვილი, მ.გაჩეჩილაძე, ჯ.მეტრეველი, რ.ხოსიტაშვილი. H₂S-ის ადსორბციის შესწავლა ბუნებრივი გოგირდმემცველი წყლებიდან. 2012, ტ.38, №4, გვ.291-293.
5. Б.А. Буров Морские научные исследования в рейсе НИС «Малахит» № 70.
6. М.В. Макарова, А.В. Поберовский, Ю.М.Тимофеев. Спектроскопические измерения общего содержания метана в районе Санкт-Петербурга. 2001.
7. ქ.კორძია. საქართველოს ატმოსფერული ჰაერის ხარისხობრივი მდგომარეობის შესწავლა და მისი დაბინძურებისგან დაცვის ზოგიერთი მეთოდი. დისერტაცია, თბილისი, 2012.

STUDY OF METHANE ADSORPTION ON NATURAL MODIFIED ZEOLITES

E.Tskhakaia, R.Khositashvili

R. Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Methane adsorption on natural modified zeolites is studied. Volume capacity relative to methane for each zeolite is calculated. It is established that among these zeolites methane adsorption is better on Khekordzula HNaX-modified zeolite and relatively less on Khekordzula clinoptilolite modified by nickel.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ МЕТАНА НА ПРИРОДНЫХ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЦЕОЛИТАХ

Е.Цхაკაია, Р.Хоситашвили

Институт неорганической химии и электрохимии им. Р.И. Агладзе

Тбилисского Государственного Университета им. И. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Исследована адсорбция метана на природных модифицированных цеолитах. Вычислена объемная емкость испытанных цеолитов к метану. Установлено, что из этих цеолитов метан хорошо адсорбирует на модифицированном цеолите HNaX и сравнительно меньше на цеолите модифицированного никелем месторождении Хекордзула.

ზოგიერთი რადიოპროტექტორის გავლენის შესწავლა სხვადასხვა ორბანული საღებრის მემბრანის გაზრდის მიზნით გამა-გამოსხივების ველში

რიმზეტ თუშურაშვილი, მერაბ ფანჩიძე, გენრიეტა შანიძე, მანანა მამარდაშვილი, ნინო კვიციანი

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის რაფიელ აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი

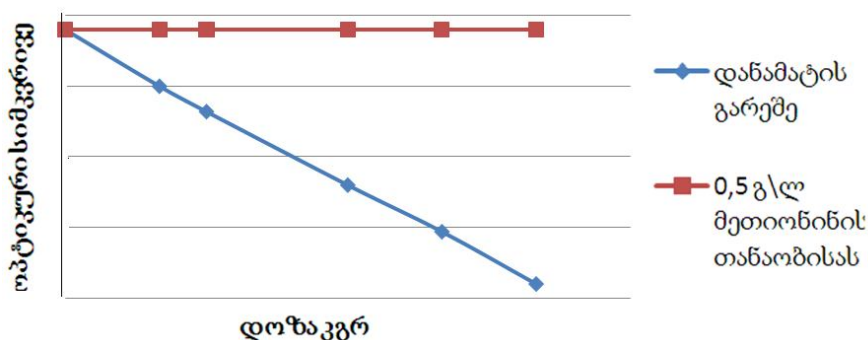
შესწავლილია ზოგიერთი ორგანული საღებრის - მეთილ ნარინჯის, ბრომპიროგალოლ წითელის და პირდაპირი წითელი-2C-ს წყალხსნარების რადიაციულ-ქიმიური გარდაქმნა ინდივიდუალურ მდგომარეობაში და სხვადასხვა დანამატების თანაობისას. დადგენილია, რომ დანამატების გარეშე ადგილი აქვს აღნიშნული საღებრების ინტენსიურ გაუფერულებას დოზითა ინტერვალში 0.1-1 კგრეი, მაშინ როცა ხსნარებში თიოშარდოვანას და მეთიონინის შეტანა მკვეთრად ზრდის მათ სტაბილურობას.

უკანასკნელ წლებში ჩვენს მიერ ჩატარებული კვლევები სხვადასხვა ორგანული საღებრის შემცველი ჩამდინარე წყლების გაწმენდის მიზნით გამა-გამოსხივების გამოყენებით და დადგენილია, რომ ხსნარების დასხივებისას ადგილი აქვს საღებრის ეფექტურ გაუფერულებას [1,2]. მუშაობის პროცესში დღის წესრიგში დადგა საკითხი აღნიშნული საღებრების დაცვისა სხვადასხვა ფაქტორის ზემოქმედებისაგან. ერთ-ერთ ასეთ ფაქტორს წარმოადგენს მაღალი ენერგიების გამოსხივება. ამ თვალთახედვით რადიაციულ-ქიმიური პროცესების შესწავლა ორგანული საღებრების წყალხსნარებში მეტად აქტუალურია ხელოვნების ნიმუშების (სურათები და სხვ.) სტაბილიზების მიზნით.

წარმოდგენილი სამუშაოს მიზანია სხვადასხვა ორგანული საღებრის სტაბილიზების შესაძლებლობის დადგენა მათზე მაღალი ენერგიების, კერძოდ, გამა-გამოსხივების ზემოქმედებისას. შესწავლილია საღებრების - მეთილნარინჯის, ბრომპიროგალოლ წითელის და პირდაპირი წითელი - 2C-ს წყალხსნარების რადიაციულ-ქიმიური გარდაქმნა. დასხივება ტარდებოდა Co-60-ს დანადგარზე 0.1 კგრეი/სთ დოზის სიმძლავრით ოთახის ტემპერატურაზე როგორც ინდივიდუალურ მდგომარეობაში, ასევე სხვადასხვა დანამატის თანაობისას.

დანამატებად გამოყენებულ იქნა სხვადასხვა გოგირდნაერთი - თიოშარდოვანა, გლუტათიონი და მეთიონინი, რომლებიც, როგორც ცნობილია, ამჟღავნებენ ძლიერ რადიოპროტექტორულ თვისებებს [3].

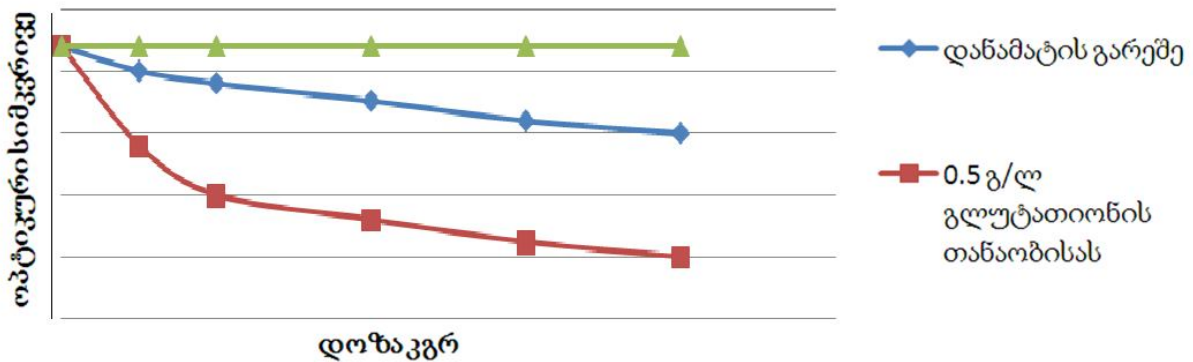
ნახ.1 მოტანილია მეთილნარინჯის $1.53 \cdot 10^{-5}$ მ/ლ კონცენტრაციის წყალხსნარის რადიოლიზის მონაცემები. როგორც ნახაზიდან ჩანს, დასხივებით ადგილი აქვს საღებრის ინტენსიურ გაუფერულებას. უკვე 0.6 კგრეი დოზით დასხივების შემდეგ გარდაიქმნება საღებრის 50%, ხოლო 1.1 კგრეი დოზის შემთხვევაში გაუფერულების ხარისხი 90%-ა (ნახ.1ა). აღნიშნულ ხსნარში 0.5გ/ლ მეთიონინის შეტანა მკვეთრად ზრდის საღებრის მედეგობას. 1 კგრეი დოზით დასხივებისას ხსნარის ოპტიკური სიმკვრივე უცვლელია (ნახ.1ბ).



ნახ. 1. მეთილნარინჯის რადიოლიზი

საღებრის - ბრომპიროგალოლ წითელის $1 \cdot 10^{-6}$ მ/ლ წყალხსნარის რადიოლიზის მონაცემები გვიჩვენებს, რომ დანამატის გარეშე ეს საღებარი საგრძნობლად უფერულდება. თუ ხსნარის საწყისი

ობტიკური სიმკვრივე $D_0=0.22$, 0.4 კვრეი ღოზით დასხივებისას $D=0.16$. შესაბამისად, გაუფერულების ხარისხი შეადგენს 30%-ს (ნახ.2ა).

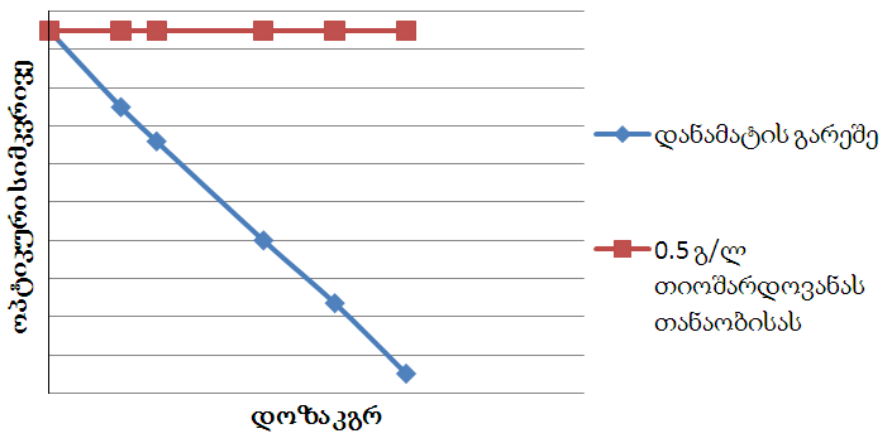


ნახ. 2. ბრომპიროგალოლწითელის რადიოლიზი

0.5 გ/ლ გლუტათიონის გამოყენების შემთხვევაში ადგილი აქვს საღებრის გარდაქმნის მკვეთრ ინტენსიფიცირებას. 0.4 კვრეი ღოზით დასხივებისას საღებრის გაუფერულების ხარისხი აღწევს 82%-ს (ნახ.2ბ).

დანამატად თიოშარდოვანას გამოყენებით მიიღწევა დასახული მიზანი - საღებრის სრული სტაბილიზაცია. ნახ.2გ-დან ცხადია, რომ გამოყენებული დოზების მთელ ინტერვალში (0.1 - 0.5 კვრეი) საღებარი პრაქტიკულად უცვლელია.

ნახ. 3 მოტანილია საღებრის - პირდაპირი წითელი - 2C-ს $1.66 \cdot 10^{-5}$ მ/ლ წყალხსნარის რადიაციულ-ქიმიური გარდაქმნის შედეგები. დანამატის გარეშე საღებარი ინტენსიურად და სწორხაზოვნად გარდაქმნება 0.1 - 1 კვრეი დოზებით დასხივებისას. საღებრის გაუფერულების ხარისხი 86%-ა (ნახ.3ა). 0.25 გ/ლ თიოშარდოვანას შეტანა იწვევს საღებრის პრაქტიკულად სრულ სტაბილიზებას გამოყენებული დოზების მთელ ინტერვალში (ნახ.3ბ).



ნახ. 3. პირდაპირი წითელი-2-ს რადიოლიზი

ამრიგად, მიღებული შედეგების საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ შესწავლილი საღებრების სტაბილიზების მიზნით გამოყენებული დანამატებიდან თიოშარდოვანა და მეთიონინი ამჟღავნებენ ძლიერ რადიოპროტექტორულ თვისებებს. რაც შეეხება გლუტათიონს, შესწავლილ სისტემებში მას არ აღმოაჩნდა დაცვითი თვისებები.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. *Тушурашвили Р.Г., Панчвидзе М.В., Шанидзе Г.В.* Известия Национальной Академии Наук Грузии, Серия химическая, 2009, т.35, №4, с. 461-463.
2. თუშურაშვილი რ., ფანჩვიძე მ., ბასილაძე ც., ხიდუმელი გ., შანიძე გ., მამარდაშვილი მ., კვირკველია ნ. საქართველოს ეროვნული მეცნიერებათა აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2012, ტ.38, №4, გვ. 328-332.
3. *Эйдус Л.Х.* Физико-химические основы радиобиологических процессов и защиты от излучений. М., Атомиздат, 1979, с. 216.

STUDY OF THE EFFECT OF SOME RADIOPROTECTORS FOR INCREASE STABILITY OF VARIOUS DYES IN THE FIELD OF GAMMA-RADIATION

Rimzet Tushurashvili, Merab Panchvidze, Genrieta Shanidze, Manana Mamardashvili, Nino Kvirkvelia

*Rafiel Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry
of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

The radiation-chemical transformation of aqueous solutions of some organic dyes – methyl orange, bromopyrogallol red and direct red-2C has been investigated in individual state and in the presence of various additives. It was established that in the absence of the additives an efficient decolouration of mentioned dyes takes place in the dose range from 0.1 to 1kGy, whereas an addition of thiourea and methionine into the solutions causes a sharp increase of the stability of investigated dyes.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НЕКОТОРЫХ РАДИОПРОТЕКТОРОВ С ЦЕЛЮ ПОВЫШЕНИЯ СТОЙКОСТИ РАЗЛИЧНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ В ПОЛЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Р.Г.Тушурашвили, М.В.Панчвидзе, Г.В.Шанидзе, М.И.Мамардашвили, Н.М.Квирквелия

*Институт неорганической химии и электрохимии им. Р.И. Агладзе
Тбилисского Государственного Университета им. И. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Исследовано радиационно-химическое превращение водных растворов некоторых органических красителей – метилового оранжевого, бромпирагаллол красного и прямого красного-2С в индивидуальном состоянии и в присутствии различных добавок. Установлено, что в отсутствие добавок происходит интенсивное обесцвечивание изученных красителей в интервале доз от 0.1 до 1кГр, тогда как введение в растворы тиомочевины и метионина резко повышает их стабильность.

**THEORETICAL STUDY OF THE SIMULTANEUS INFLUENSE OF CONDENSED MEDIA
AND ELECTRONIC EXCHANGE INTEGRAL ON A LONG -RANGE CHARGE TRANSFER
PROCESSES**

Merab Zakaraya

*Rafael Agladze Institute of Inorganic Cemistry and Electrochemistry
of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

Simultaneous influense of the condensed media and electronic exchange integral on the rate constant is theoretical studied. Dependence of the transition probability on the free energy gap, temperature and the transfer distance is considered.

The donor and acceptor orbitals in long-range electron transfer are strongly exposed to environmental inertial polarization fluctuations. The most likely polarization at the moment of electron transfer is determined by the intersection region of two potential surfaces spanned by collective polarization coordinates and depends strongly on the temperature and reaction free energy. These effects must therefore be reflected in corresponding variation of the electronic transmission coefficient with these quantities and not solely in the nuclear Franck-Condon factors. Theoretical approaches specifically to long-large electron transfer have focused on the electronic factor in diabatic electron transfer and on its dependence on the nature of the environmental matter between the electron-transfer centers. These effects have been handled by higher order perturbation and superexchange theory [1], by quantum chemical approaches involving multielectron basis sets [2], by tunnel theory [3], and by environmental continuum theory including vibrational and spatial dielectric dispersion.

On the other hand, in long –range electron transfer the “tails” of the electronic wave functions, which induce the reaction, are directly exposed to environmental polarization fluctuations. The crucial polarization configuration, with which the donor and acceptor wave functions interact at the moment of electron transfer and which determine the value of the electronic transmission coefficient, is furthermore not the equilibrium configuration but the particular nonequilibrium configuration at the intersection of two suitably constructed potential surfaces, spanned by the collective inertial polarization coordinates [4] (and the set of intramolecular coordinates). This configuration most commonly differs strongly from the equilibrium values in both the initial and final states, coinciding with these values only for activationless (strongly exothermic) and barrierless (strongly exothermic) processes, respectively. The configuration also depends strongly on both the reaction free energy and the temperature. For these reasons also the tail features of the donor and acceptor wave functions and the value of the electronic transmission coefficient depend of the temperature And reaction free energy. For long –range electron transfer these effects are comparable to effects aroused by variation of the nuclear factor and cannot be disregarded in detailed electron-transfer data analysis [5, 6].

We shell use the following single- parameter exponential form of the donor (i) and acceptor (f) Wave functions

$$\psi_i = (\lambda_i^3/\pi)^{1/2} \exp \vec{\rho}(-\lambda_i|\vec{\rho}|); \psi_f = (\lambda_f^3/\pi)^{1/2} \exp \vec{\rho}(-\lambda_f|\vec{\rho} - \vec{R}|) \quad , \quad (1)$$

where $\vec{\rho}$ is the distance from the electron transfer center \vec{R} the interreactant distance, and the only parameters are the orbital exponents λ_i and λ_f .

The choice of this simple form is prompted by the analytical transparency of the resulting electronic transmission coefficient expressions and the insight it provides as tu the variation of this quantity with the instantaneous environmental nuclear configuration, the reaction free energy, and the temperature.

The orbital exponents are estimated by the total free energy functional of the wave functions in eq 1 in the “preset” field determined by “effective” donor (Z_{DE}) and acceptor (Z_{AE}) core charges and the particular overall inertial polarization $P^*(\vec{r})$ at the moment of electron transfer, \vec{r} being a space coordinate and e the (numerical) electronic charge. The free energy functional in the initial state is

$$F_i[\psi_i; \bar{P}^*(\vec{r})] = \frac{\hbar^2}{2m_e} \int |\nabla \psi_i|^2 d\vec{\rho} - \int \bar{P}^*(\vec{r}) \bar{D}_i^e(\psi_i; \vec{r}) d\vec{r} - \frac{Z_D e^2}{\epsilon_0} \int d\vec{\rho} \frac{1}{\rho} |\psi_i|^2 - \frac{Z_D e^2}{\epsilon_0} \int d\vec{\rho} \frac{1}{|\vec{\rho} - \vec{R}|} \psi_i^2 \quad (2)$$

with a similar equation for the product state, m_e is the electronic mass, \hbar – Planck's constant divided by 2π , ϵ_0 the inertiales (optical) dielectric constant, and $\bar{D}_i^e(\psi_i; \vec{r})$ the electronic vacuum field aroused by the electron to be transferred, $\bar{D}_i^e(\psi_i; \vec{r})$ is specifically

$$\bar{D}_i^e(\psi_i; \vec{r}) = -e \int d\vec{\rho} |\psi_i|^2 \frac{\vec{r} - \vec{\rho}}{|\vec{r} - \vec{\rho}|^3} \quad (3)$$

The first term in eq 2 is the kinetic energy of the electron; the second one is its potential energy in the nonequilibrium polarization field created by the donor and acceptor ionic centers and by the “excess” electron itself. The last two terms represent the potential energies of interaction of the electron with the donor and acceptor ionic centers. These interactions have the correct form at long distances and are screened only by the inertialess polarization, as the inertial part is included in $\bar{P}^*(\vec{r})$.

$\bar{P}^*(\vec{r})$ is finally available from the initial- and final - state equilibrium polarizations $\bar{P}_i(\vec{r})$ and $\bar{P}_0(\vec{r})$, respectively, by prescriptions in electron – transfer theory [4-6]. In the high - temperature limit

$$\bar{P}^*(\vec{r}) = (1 - \theta^*) \bar{P}_i(\vec{r}) + \theta^* \bar{P}_0(\vec{r}) \quad (4)$$

where θ^* is the transfer coefficient (the Bronsted coefficient) of electron – transfer theory and is a measure of the variation of the transition probability, W , with the reaction free energy, ΔG_0 , i. e.

$$\theta^* = -k_B T d \ln W_n / d \Delta G_0, \quad (5)$$

k_B being Boltzmann's constant and T the temperature. In the high-temperature limit $\bar{P}_i(\vec{r})$ and $\bar{P}_0(\vec{r})$ are simply related to the vacuum fields of the excess electron in the initial and final states, $\bar{D}_{i_0}^e$ and $\bar{D}_{f_0}^e(\vec{r} - \vec{R})$, respectively, and of the donor $\bar{D}_D^e(\vec{r})$ and acceptor cores, $\bar{D}_A^e(\vec{r})$, i.e.

$$\begin{aligned} \bar{P}_i(\vec{r}) &= \frac{c}{4\pi} [\bar{D}_{i_0}^e(\vec{r}) + \bar{D}_D^e(\vec{r}) + \bar{D}_A^e(\vec{r} - \vec{R})] \\ \bar{P}_0(\vec{r}) &= \frac{c}{4\pi} [\bar{D}_{f_0}^e(\vec{r} - \vec{R}) + \bar{D}_D^e(\vec{r}) + \bar{D}_A^e(\vec{r} - \vec{R})] \end{aligned} \quad (6)$$

where $c = \epsilon_0^{-1} - \epsilon_s^{-1}$ and ϵ_s the static dielectric constant. At lower temperatures the environmental vibrational dispersion must be included, such as treated in detail elsewhere.

λ_i and λ are obtained from eq 4 – 6 by a variational scheme that consists of the following steps:

(A) The free energy functional are first calculated at given θ^* ; i.e., $F_i = F_i(\theta^*)$ and $F = F(\theta^*)$ by inserting eq 1,3,4, and 6 into eq 2.

(B) The functional are next minimized with respect to the variational parameters λ_i and λ_f . From this step the dependence of λ_i and λ_f on θ^* emerges; i.e., $\lambda_i = \lambda_i(\theta^*)$ and $\lambda_f = \lambda_f(\theta^*)$.

(C) The latter relations can be converted to the corresponding dependence of λ_i and λ_f on ΔG_0 and T by means of electron –transfer theory [4-6]. In particular, $\theta^* = 0$ for activationless processes where $\Delta G_0 = -E_s$ and E_s is the total environmental reorganization free energy, while $\theta^* = 0.5$ when $\Delta G_0 = 0$.

(D) In the high-temperature limit and when the donor – acceptor distance is sufficiently large that the interaction of the donor electron with the acceptor region can be disregarded, the estimate of $\lambda_i(\theta^*)$ can be brought to rest on the following simple form

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \lambda_i - (1 - \theta^*) \frac{e^2}{2\pi} \left(\frac{\lambda_{i0}}{\lambda_i}\right)^4 \int_0^\infty \frac{du}{[(\lambda_{i0}/\lambda_i)^2 + u^2]^2 (1 - u^2)^3} = 0 ; \lambda_i = \lambda_i(\theta^*) \quad (7)$$

where λ_{i0} is the value of λ_i equilibrium, i.e. for $\theta^* = 0$. $\lambda_f(\theta^*)$ can be similarly determined.

(E) The following simple result valid for $\theta^* \lesssim 0.3$ emerges when eq 7 is expanded around $\theta^* = 0$.

$$\lambda_i(\theta^*) = \lambda_{i0} (1 - \xi_i \theta^*) ; \quad \xi_i = \frac{5/11}{1 + (16/11)(Z_D/5c\epsilon_f)} \quad (8)$$

The corresponding equation for $\lambda_f(\theta^*)$ is

$$\lambda_f(\theta^*) \approx \lambda_{f0} [1 - \xi_f (1 - \theta^*)] ; \quad \xi_f = \frac{5/11}{1 + (16/11)(Z_A/5c\epsilon_f)} \quad (9)$$

These equations show in a more transparent form that the environmental field variation along the solvent potential has caused both the donor and acceptor electron clouds to “swell” in the normal free energy region ($\theta^* > 0$), as the nonequilibrium inertial polarization becomes increasingly unfavorable. Opposite effects, i.e. electron cloud contraction, emerge in the inverted free energy range where ($\theta^* < 0$).

Given results are useful for numerical calculations of chemical and biochemical processes.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Kuznetsov, A.M., Ulstrup, J. In situ superexchange electron transfer through a single molecule: A rectifying effect. *J. Chem. Phys.* 1981, 75, 2047.
2. Newton, M.D., *In situ* superexchange electron transfer through a single molecule: A rectifying effect. *Int. J. Quantum Chem. Quantum Chem. Sump.* 1980, 14, 363.
3. Mikkelsen, K.V., Ratner, M.A. Electron-Transfer Reactions in Proteins. *Int. J. Quantum Chem. Quantum Chem. Symp.* 1987, 21, 341.
4. Dogonadze, R.R., Kuznetsov, A. M. *Physical Chemistry. Kinetics*; VINITI: Moscow, 1973
5. Zhang, J. Kuznetsov, A. M., Medvedev, I.G., Chi, Q., Albrecht, T., Jensen, P. S. and Jens Ulstrup, Single-Molecule Electron Transfer in Electrochemical Environments. *Chem. Rev.* 2008, 108, 2737–2791.
6. Закарая М.Г., Марсагишвили Т.А., Хоштария Д.Э. Элементарные процессы в конденсированных средах. АН ГССР, Ин-т неорган. химии и электрохимии; 259 с. Тбилиси, Мецნიერება, 1989.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СОВМЕСТНОГО ВЛИЯНИЯ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ И ЭЛЕКТРОННОГО ОБМЕННОГО ИНТЕГРАЛА НА ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА НА БОЛЬШИХ РАССТОЯНИЯХ

М.Г.Закарая

*Тбилисский государственный университет им. И. Джавახишвили
Институт неорганической химии и электрохимии им. Р.И. Агладзе*

РЕЗЮМЕ

Дано теоретическое рассмотрение совместного влияния конденсированной среды и электронного обменного интеграла на скорость процесса переноса заряда. Изучено влияние зависимости вероятности процесса протекания от свободной энергии реакций, температуры и расстояния переноса заряда.

შორ მანძილზე მუხტის გადატანაზე კონდენსირებული გარემოსა და ელექტრონული გაცვლითი ინტეგრალის ერთობლივი ზემოქმედების ემპირიული შეფასება

მერაბ ზაქარაია

*ივ. ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
რაფიელ აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი
რეზიუმე*

მოცემულია თეორიული განხილვა კონდენსირებული გარემოსა და ელექტრონული გაცვლითი ინტეგრალის ერთობლივი ზემოქმედების მუხტის გადატანის სიჩქარეზე. შესწავლილია გადასვლის ალბათობის დამოკიდებულება რეაქციის თავისუფალი ენერგიის ცვლილებაზე, ტემპერატურასა და მუხტის გადატანის სიწმინდეზე.

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ И ПЕТРОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОВЕДЕНИЯ РЯДА
КОМПОЗИЦИЙ СИСТЕМЫ $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$
ПРИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ**

А.В.Саруханишвили, Д.П.Бибилеишвили, Н.Ш.Андгуладзе, К.З.Кобиашвили

Грузинский Технический Университет

В качестве объектов исследования взяты три композиции системы $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$, потенциально обеспечивающие возможность получения аморфных композитов с комплексом ценных физико-химических свойств для нужд электротехники и электроники.

Область составов композитов охватывает следующие пределы отдельных оксидов (мас%): SiO_2 50-60; B_2O_3 15-30; BaO 5-10; Na_2O 10-15. Оксидный состав композиций, обеспечивающих получение 100 (мас %) композита, приведен в табл.1.

Термодинамическая оценка процессов, протекающих в указанных композициях в интервале 298–1573 К, производилась методом минимизации свободной энергии Гиббса (ММСЭ). Для реализации этого метода использовались I и II приближения Улиха, уравнение Шварцмана – Темкина и классический метод. Использование последнего служило средством оценки результатов, получаемых тремя остальными методами реализации ММСЭ. Было установлено, что I приближение Улиха обеспечивает вполне приемлемые результаты до 1223–1273К, а II приближение и уравнение Шварцмана-Темкина до 1523–1573К.

Для качественной оценки фазовых равновесий использовались сведения, содержащиеся в частных диаграммах состояния исследуемой системы, а количественные показатели устанавливались петрохимическими перерасчетами.

Анализ литературных сведений о поведении борной кислоты при термической обработке (например, [1]) показал, что в интервале температур 442–723 К возможно наличие по крайней мере 10 инвариантных точек, образованных с участием H_3BO_3 , трех модификаций HBO_2 и B_2O_3 . Эти преобразования не могли не оказать влияние на характер взаимодействий между компонентами исследуемых композиций в результате термической обработки.

Целью настоящей работы являлось установление степени воздействия вышеуказанных превращений борной кислоты на процессы, протекающие в композициях и на фазовые составы получаемых на отдельных стадиях термообработки продуктов.

Таблица 1. Оксидный состав композиций.

№ Композиции	Оксидный состав композиций, мас.ч/моли						
	SiO_2	B_2O_3	BaO	Na_2O	CO_2	H_2O	Σ
1	50,70	14,70	21,60	13,00	11,40	15,40	126,8
	0,8438	0,2112	0,1409	0,2098	0,3507	0,6336	2,3908
2	56,38	21,85	12,09	9,68	10,34	16,95	127,29
	0,9384	0,3138	0,0788	0,1562	0,2362	0,9445	2,6636
3	41,50	28,80	21,20	8,60	12,20	21,80	134,10
	0,6907	0,4050	0,1383	0,1387	0,2770	1,2150	2,8647

Используя сведения представленные в [2,3], были рассчитаны изменение свободной энергии Гиббса (ΔG^0_p) и логарифмов констант равновесий ($\lg K_p$) процессов при 500 К, представленные в таблице 2 под номерами 1-4.

Судя по величинам ΔG^0_{p500} и $\lg K_p$, термодинамически наиболее выгодным представляется процесс диссоциации 2, что следовало учесть при взаимодействиях борной составляющей с иными компонентами композиции.

Термодинамическими расчетами было установлено, что с борной составляющей при низких температурах термообработки энергетически наиболее выгодными должны быть взаимодействия типа $\text{B}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O} + \text{Na}_2\text{CO}_3$. Результаты оценок этих взаимодействий представлены реакциями 5-10 в таблице 2

Таблица 2. Термодинамические показатели степени выгодности процессов

№ процесс- сов	Процессы	$\Delta G^0_{p,500}$ и $lgkp_{,500}$	
		$\Delta G^0_{p,500}$ ккал/моль	$lgkp_{500}$
1	$B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) \rightarrow B_2O_3(kp) + 3H_2O(r)$	-7.35	3.23
2	$B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) \rightarrow B_2O_3 \cdot H_2O(kp.1)^* + 2H_2O(r)$	-12.23	5.27
3	$B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) \rightarrow B_2O_3 \cdot H_2O(kp.2)^* + 2H_2O(r)$	-5.10	2.23
4	$B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) \rightarrow B_2O_3 \cdot H_2O(kp.3)^* + 2H_2O(r)$	-5.35	2.35
5	$B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) + Na_2CO_3(kp) \rightarrow Na_2O \cdot B_2O_3(kp) + 3H_2O(r) + CO_2(r)$	-14.52	6.34
6	$2(B_2O_3 \cdot 3H_2O(kp) + Na_2CO_3(kp)) \rightarrow Na_2O \cdot 2B_2O_3(kp) + 6H_2O(r) + CO_2(r)$	-37.94	16.13
7	$4(B_2O_3 \cdot 3H_2O)(kp) + Na_2CO_3(kp) \rightarrow Na_2O \cdot 4B_2O_3(kp) + 12H_2O(r) + CO_2(r)$	-68.04	29.74
8	$B_2O_3 \cdot H_2O(kp) + Na_2CO_3(kp) \rightarrow Na_2O \cdot B_2O_3(kp) + H_2O(r) + CO_2(r)$	-2.00	0.87
9	$2(B_2O_3 \cdot H_2O)(kp) + Na_2CO_3(kp) \rightarrow Na_2O \cdot 2B_2O_3(kp) + 2H_2O(r) + CO_2(r)$	-10.81	4.81
10	$4(B_2O_3 \cdot H_2O)(kp) + Na_2CO_3(kp) \rightarrow Na_2O \cdot 4B_2O_3(kp) + 4H_2O(r) + CO_2(r)$	-18.71	8.18

Примечание (kp.1) – соответствует кубической модификации $B_2O_3 \cdot H_2O$; (kp.2) – моноклинной; (kp.3) – орторомбической.

Оказалось, что при одной и той же температуре протекание реакций (процессов) 2 и 5 энергетически почти одинаково выгодно, что должно привести к “вмешательству” взаимодействия между $B_2O_3 \cdot 3H_2O$ и Na_2CO_3 в нормальный ход диссоциации борной кислоты. Соответственно возможно нарушение последовательности образования жидкой фазы.

Рассмотрение результатов термодинамических расчетов значительного множества вариантов, возможных в процессе образования жидкой фазы в низкотемпературной области термообработки, привело к заключению необходимости принятия двух допущений. Принятие этих допущений обеспечивало полную выгодность процессов, протекающих в системе.

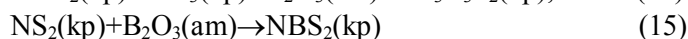
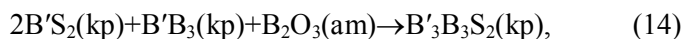
Первое допущение предполагало протекание равных долей всех превращений приводящих к образованию жидкой фазы, характерных для индивидуального поведения H_3BO_3 в интервале температур 298–773 К. Вторым допущением “разрешалось” участие Na_2CO_3 в реакциях с $B_2O_3 \cdot 3H_2O$ и с продуктом диссоциации этого вещества по процессу 2 (см.табл.2). Выбор Na_2CO_3 в качестве первого реагента, вступающего во взаимодействие с борсодержащими ингредиентами (см.табл.2, реакции 5-10) основывался на результатах термодинамических расчетов всех возможных процессов, протекающих в системе в интервале 298–500 К.

Дальнейшие исследования проводились с использованием указанных допущений в ходе оценки поведения композиций 1-3 в температурных интервалах 298–873 и 873–1273 К. Для наглядности последовательности наших действий в ходе достижения поставленной цели предлагаются табл. 3 и 4, где приводятся сведения, полученные термодинамическими и петрохимическими расчетами процессов, протекающих в композиции 1 с учетом первого допущения.

Расчеты показывают, что в результате термообработки в интервале 298-1273К получается композит с доминантным содержанием L (73,49 мол.%). В равновесии с L обнаруживаются SiO_2 (1,31 мол%) и BS_2 (25,20 мол%).

Композит, получаемый с учетом второго допущения содержал те же, но несколько отличающиеся по количеству фазы ($L \approx 77$; $SiO_2 = 17$; $BS_2 = 6$ мол%).

Проведение аналогичных по содержанию, но отличающихся от уже приведенных в табл. 3,4 расчетов количественными показателями работ принятием во внимание условий второго допущения в случае композиций 2,3 дали результаты, представленные в табл. 5. В этой таблице приводятся сведения о т.н. промежуточных и конечных продуктов, получаемых в тех же интервалах температур, что и ранее. Оказалось, что учет второго допущения приводит к несколько иному ходу получения промежуточного продукта, чем в случае принятия первого допущения. Основной причиной этого являются взаимодействия с образованием тройных соединений



и смещение температур образования боратов и силикатов. Однако, эти различия не оказывают значительное влияние на качественные показатели фазовых равновесий получаемых композитов. Изменения в основном касаются количественных показателей.

Таблица 3. Оценка процессов, протекающих в композиции 1 в результате в области 298–873К

Составы		Превращения в композиции, моль							Промежуточный и окончательный составы, моль			
Соединения	Кол-во	443К Iэвт. тика	443К IIэвт. тика	443К IIIэвт. тика	444К Плавле- ние ВН ₃	400-873К Реакция 6	300-873К Реакция 7	723К Плавле- ние В ₂ O ₃	298-873К		873-1273К	
									В сист.	Вне сист.	Состав композиции	
SiO ₂	0.8438	-	-						0,8438	-	0,8438	
B ₂ O ₃	0.2112	0,0042	0,0042	0,0042	0,0042	0,0528	0,1056	0,0360				
BaO	0.1409								0,1409		0,1409	
Na ₂ O	0.2098	0.2098				0,0264	0,0264		0,1570	-	0,1570	
H ₂ O	0.6336	0,0126	0,0126	0,0126	0,0126	0,1584	0,3168	0,1080		0,4752		0,6336
CO ₂	0.3507					0,0264	0,0264			0,0528	0,2979	0,2978
Σ	2,3900											
NB ₂						0,0792			0,0792		0,0792	
NB ₄							0,1320		0,1320		0,1320	
BH								0,1440	0,1440			
Σ		0,0168	0,0168	0,0168	0,0168			0,0360	0,0672		0,0578	
Σ									1,8620	0,5280	1,7036	0,6864
Σ	2,3900								2,3900		2,3900	

Примечание Условные обозначения: NB₂ - N₂O•2B₂O₃; NB₄ - Na₂O•4B₂O₃; BH - B₂O₃•H₂O; Эвт.1 - BH₂(K3)+B₂O₃+4Эвт.2 - BH₂(K2)+B₂O₃+4Эвт.1 - BH₂(K3)+B₂O₃+4. Промежуточный состав получен с учетом наличия H₂O в эвтектиках. Окончательный состав принят с учетом участия аморфного B₂O₃ в образовании боратов натрия.

Таблица 4. Оценка процессов, протекающих в композиции 1 в результате термообработки в области 873–1273К

Состав		Реакции		Результаты		Эвтектики, моль		Плав- ление NB ₂ 1015К	Состав композиита	
Соеди- нения	Кол- во, моль	N11, NS ₂ , моль	N12, BS ₂ , моль	В систе- ме, моль	Вне Системы, моль	Q+NS ₂ + BS ₂ +L+ 995К	NB ₄ +Q+ L 948К		Кол-во молей	Моль%
SiO ₂	0,8438	0,3140	0,2818	0,2480	-	0,1575	0,0721		0,0184	1,31
BaO	0,1409	-	0,1409	-	-	↓	↓		-	-
Na ₂ O	0,1570	0,1570	-	-	-	↓	↓		-	-
CO ₂	0,2979	0,1570	0,1409	-	0,2979	↓	↓		-	-
L	0,0528	-	-	0,0528	-	0,6969	0,2041	0,0792	1,0330	73,49
NB ₂	0,0792	-	-	0,0792	-	↑	↑	0,0792	-	-
NB ₄	0,1320	-	-	0,1320	-	↑	0,1320		-	-
NS ₂	-	0,4710	-	0,4710	-	0,4710				
B'S ₂	-	-	0,4227	0,4227	-	0,0684			0,3543	25,20
Σ	-	-	-	1,4057	0,2979				1,4057	100,00
Σ	-			1.7036						

Примечание. Усл.обозн: NS₂ - Na₂O•2SiO₂; B'S₂ - BaO•SiO₂; Q - SiO₂; Реакции: N11- Na₂CO₃+2Q→NS₂+CO₂; N12 - NaCO₃+2Q→B'S₂+CO₂. Стрелками указаны компоненты, участвующие в образовании эвтектик.

Таблица 5. Свободные сведения о промежуточном и окончательном составах композитов 2 и 3.

Композит 2				Композит 3			
Промежуточный Состав (298-873 К)		Окончательный Состав (873-873 К)		Промежуточный Состав (298-1273 К)		Окончательный Состав (873-1273 К)	
Соединения	Кол-во молей	Моль	Мол%	Соединения	Кол-во молей	Кол-во молей	Моль%
SiO ₂	0,9384	0,4417	29,70	SiO ₂	0,5089	0,3159	22,20
BaO	0,0668			BaO	0,0147		
Na ₂ O	0,1033			CO ₂	0,0147		
CO ₂	0,1701			NB ₄	0,2115		
NB ₂	0,0987			NB ₂	0,0924		
NB ₄	1,0000			NS ₂	0,1968		
B'B ₂	0,0359			B'B	0,1458		
L	0,1441	1,0455	70,30	B'B ₂	0,0760		
Σ	1,6573	1,4872	100,00	B'S ₂	0,0760	0,0383	2,69
Усл. обозн: B'B ₂ -BaO·2B ₂ O ₃ ; B'B-BaO·B ₂ O ₃ ; L – жидкая фаза				L	0.0506	1.0691	75.11
				Σ	1.3874	1.4233	100.00

Увеличение температуры термообработки для достижения макрогетерогенного твердого тела, получаемого переохлаждением расплава, должно служить увеличению скорости растворения кристаллических включений и гомогенизации расплава. Термодинамическое прогнозирование параметров этих процессов связано с большими сложностями, однако на основе информационных данных (например [4,5]) можно предположить, что полное растворение кристаллических включений должно завершиться при термообработке в интервале 1273–1523 К, а гомогенизация в интервале 1523–1573 К.

Таким образом, следует заключить, что независимо от применения первого или второго допущений, схемы протекающих процессов в композициях указанных составов, можно представить в следующем виде:

- 298-403К – Удаление гигроскопической воды;
- 403-773К – Превращения, связанные с борсоставляющей композиций. Появление жидкой фазы, протекание взаимодействий борсоставляющей с иными составляющими композиции с образованием боратов натрия и бария ($m\text{Na}_2\text{O}\cdot n\text{B}_2\text{O}_3$ и $m\text{BaO}\cdot n\text{B}_2\text{O}_3$);
- 773-973К – Протекание взаимодействий карбонатов с SiO₂ образование силикатов ($m\text{Na}_2\text{O}\cdot n\text{SiO}_2$ и $m\text{BaO}\cdot n\text{SiO}_2$). Возможно начало взаимодействий с образованием тройных соединений. Значительное количество SiO₂ во взаимодействия не вступает;
- 973-1273К – Образование эвтектик и плавление отдельных соединений, резкий рост жидкой фазы и полное удаление летучих ингредиентов, начало гомогенизации расплава;
- 1523-1573К – получение макрогомогенного расплава.

Рекогносцировочные эксперименты показали близость результатов прогнозирования к реально протекающим процессам и составу продуктов, получаемых вследствие этих процессов, хотя требуют проведения более тщательных исследований. О результатах этих исследований будет сообщено в последующих публикациях.

ლიტერატურა - REFERENCES –ЛИТЕРАТУРА

1. Безбородов М.А. Синтез и строение силикатных стекол. Минск: Наука и техника, 1968, с. 93-113.
2. HarumiYokokava. Tables of Thermodynamic Properties of Inorganic compounds I. Nat. chem. Lab. Ind, 1998, v.83, p.27-121
3. Бабушкин В.И., Матвеев Г.М., Мчедлов-Петросян О.П. Термодинамика силикатов. М., Стройиздат. 1986-408 с.
4. Справочник по производству стекла. Т.2.П/Р И.И. Китайгородского и С.И. Сильвейстровича. М., Стройиздат. 1963, - С.130-202
5. McLellan G.W., E.B. Shand, Glass Engineering Handbook, N -Y; MxGraw – Book Comp, 1984. P.7.4-7.11.

თერმოდინამიკური და პეტროქიმიური შეფასება $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$ სისტემის რიბი კომპოზიციის მქონის თერმოდინამიკური და პეტროქიმიური შეფასება

არჩილ სარუხანიშვილი, დენიტა ბიბილეიშვილი, ნიკოლოზ ანდგულაძე, ქეთევან კობიაშვილი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

რეზიუმე

წარმოდგენილია $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$ სისტემის სამ კომპოზიციაში მიმდინარე პროცესებისა და მათ შედეგად მიღებული პროდუქტების ფაზური შედგენილობის თერმოდინამიკური და პეტროქიმიური ანალიზის შედეგები. გამოთქმულია მოსაზრება, რომ შეფასებისადმი განსხვავებული მიდგომების მიუხედავად, სასრული პროდუქტი უფრო მეტად რაოდენობრივად, ვიდრე ხარისხობრივად იცვლება.

TERMODINAMIC AND PETROCHEMICAL ESTIMATION OF BEHAVIOR SOME COMPOSITION OF THE $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-BaCO}_3\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-SiO}_2$ SISTEM

Archil Sarukhanishvili, Denita Bibileishvili, Nikoloz Andguladze, Ketevan Kobiashvili

Georgian Technical University

SUMMARY

The paper reflects the results of a thermodynamic test, together with the petrochemical calculations of the phase composition of the three composite system $\text{Na}_2\text{CO}_3 - \text{BaCO}_3 - \text{H}_3\text{BO}_3 - \text{SiO}_2$ products subjected to the thermal treatment. The author suggests that different approaches to the estimation at the low temperature performance of the boron element of the system may lead to varying interpretations of the phase composition of the products formed at the intermediate stages of the thermal treatment. However, the latter circumstance makes a stronger impact on the qualitative indicators of the phase composition of the products derived at the final stage thermal treatment rather than the qualitative ones.

დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

გიორგი ჩაჩავა, მაია რუსია, ლევან ლობჯანიძე, მიხეილ გვერდწითელი
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

მოლეკულებისა და მათი ქიმიური გარდაქმნების შესასწავლად მათემატიკურ ქიმიაში წარმატებით გამოიყენება მოლეკულური დესკრიპტორები (ტოპოლოგიური ინდექსები) [1-3]. მოლეკულური დესკრიპტორების დიდი ნაწილი აგებულია მოლეკულური გრაფების თანაზიარობის მატრიცებისა და მათი მოდიფიცირებული სახესხვაობების ბაზაზე [4]. რნბ-მატრიცა მიეკუთვნება ამ კლასს. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების რიგობრივი ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიურ ბმათა ჯერადობები [5].

ჩატარებულია დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტთა (As, Sb, Bi) ჰიდრიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა რნბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. ამ მოლეკულათა ზოგადი ფორმულაა:



სადაც, X = As, Sb, Bi. შესაბამის რნბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

$$\left\| \begin{array}{cccc}
 Z_X & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & 1 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \right\|
 \tag{2}$$

ამ მატრიცის დეტერმინანტი ტოლია:

$$\Delta_{\text{რნბ}} = Z_X - 3
 \tag{3}$$

ცხრილში მოტანილია $\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$ და $\Delta H_{f,298}^0$ დარიშხანის ქვეჯგუფის ელემენტთა ჰიდრიდებისათვის [6].

H ₃ X	H ₃ As	H ₃ Sb	H ₃ Bi
$\lg(\Delta_{\text{რნბ}})$	1,48	1,68	1,90
$\Delta H_{f,298}^0$, კჯ/მოლი	66,4	145	(234)

აგებულია კორელაციური განტოლება: $\Delta H_{f,298}^0 = 393,0 \lg(\Delta_{\text{რნბ}}) - 515,2$ (4)

$\Delta H_{f,298}^0$ H₃Bi-სათვის გამოთვლილია თეორიულად, (4) კორელაციური განტოლების გამოყენებით.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. გ. გამზიანი, ნ. კობახიძე, მ. გვერდწითელი. ზოგი რამ ტოპოლოგიური ინდექსების შესახებ. თბილისი, 1995.
2. გ. ლეკიშვილი, ლ. ასათიანი. მოლეკულური დისკრიპტორები ელემენტორგანულ ნაერთთა ქიმიაში. თბილისი, 1998.
3. P.R. Ruray. Chemical Applications of Topology and Graph Theory. Amsterdam, 1983.
4. M. Gverdtsiteli, G. Gamziani, I. Gverdtsiteli. The contiguity matrices of molecular graphs and their modifications. Tbilisi, 1996.

5. Сидамонидзе Н.Н., Купатадзе К.Т., Гвердцители М.И. Теоретическое исследование корреляции „структура-свойства” в рамках методов ПНС-, квази-ПНС и ЭП-матриц. Прикладная физика, 2009, №6, с. 36-39.
6. Akhmetov N. General and Inorganic Chemistry. Moscow, 1983, p. 385.
7. Kapatadze K., Lobzhanidze T., Gverdsiteli M. Algebraic-chemical investigation of some organic molecules and their transformations. Tbilisi, 2007.

MATHEMATICAL-CHEMICAL INVESTIGATION OF THE HYDRIDES OF THE ELEMENTS OF ARSENIC SUBGROUP

Giordi Chachava, Maia Rusia, Levan Lobdjanidze, Mikheil Gverdsiteli
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Correlation equation of “structure-properties” type is constructed for the hydrides of the elements of arsenic subgroup within the scope of ANB-matrices method. The value of $\Delta H_{f,298}^0$ for H_3Bi was calculated theoretically.

МАТЕМАТИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРИДОВ ЭЛЕМЕНТОВ ПОДГРУППЫ МЫШЬЯКА

Г.Н.Чачава, М.Ш.Русия, Л.В.Лобжанидзе, М.И.Гвердцители
Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Построено корреляционное уравнение типа “структура-свойства” для гидридов элементов подгруппы мышьяка в рамках метода ПНС-матриц. Теоретически вычислены значения $\Delta H_{обр.,298}^0$ для H_3Bi .

ზოგიერთი d-მეტალის ჰიდრიდის მათემატიკურ-ქიმიური ბამოკვლევა ანბ-მატრიცების მეთოდის უარბლეში

ნინო კუბატაძე, მიხეილ გვერდწითელი
 ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ანბ-მატრიცების მეთოდის უარგლებში აგებულია და შესწავლილია „სტრუქტურა-თვისებების“ ტიპის კორელაციური განტოლება III ჯგუფის B ქვეჯგუფის მეტალთა ჰიდრიდებისათვის: ScH₂, YH₂ და LaH₂ კორელაცია „ბრწყინვალე“.

მოლეკულური გრაფების თანაზიარობის მატრიცების მრავალრიცხოვანი მოდიფიკაციები ფართოდ გამოიყენება მოლეკულებისა და მათი ქიმიური გარდაქმნების მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლის მიზნით [1-2]. ანბ-მატრიცა ასეთ მატრიცათა ტიპს მიეკუთვნება. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიური ბმების ჯერადობა [3, 4].

ნებისმიერი ABC აღნავობის მქონე მოლეკულისათვის ანბ-მატრიცას შემდეგი სახე აქვს:

$$\begin{vmatrix} Z_A & \Delta_{AB} & \Delta_{AB} \\ \Delta_{AB} & Z_B & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AC} & \Delta_{BC} & Z_C \end{vmatrix} \quad (1)$$

სადაც: Z_A, Z_B და Z_C A, B და C ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრებია, Δ_{AB}, Δ_{AC} და Δ_{BC} A~B, A~C და B~C ქიმიური ბმების ჯერადობებია.

შესწავლილია პერიოდული სისტემის III ჯგუფის B ქვეჯგუფის მეტალთა ჰიდრიდები: ScH₂, YH₂ და LaH₂.

მათი ზოგადი მოდელია: MH₂ (2)
 შესაბამისი ანბ-მატრიცა

$$\begin{vmatrix} Z_M & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (3)$$

ცხრილში მოტანილია lg(Δ_{ანბ}) და ΔH⁰_{f,298} (წარმოქმნის სტანდარტული ენთალპიები) [5] ნაერთებისათვის:

იღრიდი	ScH ₂	YH ₂	LaH ₂
lg(Δ _{ანბ})	1,28	1,57	1,74
ΔH ⁰ _{f,298} , კჯ/მოლ	-69	-186	-208

უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით კომპუტერზე აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\Delta H_{f,298}^0 = -302 \lg(\Delta_{ANB}) + 318 \quad (4)$$

კორელაციის კოეფიციენტი r შესაბამისად ტოლია 0,991. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმებით[6], კორელაცია „ბრწყინვალეა“.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Rurvy P.R. Chemic Application of Topology and Graph Theory. Amsterdam, 1983.
2. ლეკიშვილი გ., ასათიანი ლ. მოლეკულური დისკრიპტორები ელემენტორგანულ ნაერთთა ქიმიაში. თბილისი, 1998.
3. Gverdtsiteli M., Gamziani G., Gverdtsiteli I. The Contiguity Matrices of Molecular Graphs and Their Modifications. Tbilisi, 1996.
4. Сидамонидзе Н.Н., Купатадзе К.Т., Гвердцители М.И. Теоретическое исследование корреляции „структура-свойства“ в рамках методов ПНС-, квази- ПНС- и ЭП матриц. Прикладная физика, 2009, №6, 36-39.
5. Akhmetov N. General and Inorganic Chemistry. Moscow, 1989, p.285.
6. გვერდწითელი მ. ფიზიკური ორგანული ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, 1982, გვ.19.

MATHEMATICAL-CHEMICAL INVESTIGATION OF THE HYDRIDES OF SOME d-METALS WITHIN THE SCOPE OF ANB-MATRICES METHOD

Nino Kupatadze, Mikheil Gverdtsiteli
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Within the scope of ANB-matrices method the correlation equation of „structure-property” type was constructed and investigated for ScH₂, YH₂ and LaH₂. Calculation shows that the correlation is „excellent”.

МАТЕМАТИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРИДОВ НЕКОТОРЫХ d-МЕТАЛЛОВ В РАМКАХ МЕТОДА АНП-МАТРИЦ

Н.О.Купатадзе, М.И.Гвердцители
Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

В рамках метода АНП-матриц построено и исследовано корреляционное уравнение типа „структура-свойства” для ScH₂, YH₂ и LaH₂. Корреляция „отличная”.

**MATHEMATICAL-CHEMICAL INVESTIGATION OF ARSENIC (III) HALIDES WITHIN
THE SCOPE OF ANB-MATRICES METHOD**

K.Kupatadze, M.Rusia*, M.Gverdsiteli*

Ilia State Universiti

**I.Javakhishvili Tbilisi State University*

Within the scope of ANB-matrices method arsenic (III) halides were studied. Four correlation equations were constructed and investigated. The correlations are satisfactory.

ANB-matrices belong to the modified type of contiguity matrices of molecular graphs and are efficiently used in mathematical chemistry for investigation of molecules and their transformations [1].

The diagonal elements of ANB-matrix are the atomic numbers of the chemical elements, nondiagonal ones-the multiplicities of the chemical bonds [2,3]. For arbitrary XYV molecule, corresponding ANB-matrix has a form:

$$\begin{vmatrix} Z_X & \Delta_{XY} & \Delta_{XV} \\ \Delta_{XY} & Z_Y & \Delta_{YV} \\ \Delta_{XV} & \Delta_{YV} & Z_V \end{vmatrix} \quad (1)$$

where: Z_X, Z_Y, Z_V are the atomic numbers of the chemical elements X,Y,V; $\Delta_{XY}, \Delta_{XV}, \Delta_{YV}$ are the multiplicities of the chemical bonds between X and Y, X and V, Y and V.

The general formula of arsenic (III) halids is:



where: X=F,Cl,Br,I.

Corresponding ANB-matrix has a form:

$$\begin{vmatrix} 33 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & Z_X & 0 & 0 \\ 1 & 0 & Z_X & 0 \\ 1 & 0 & 0 & Z_X \end{vmatrix} \quad (3)$$

where: 33 is the atomic number of arsenic.

$\lg(\Delta_{\text{ANB}})$, E^* (the sum of three As-X bond energies), ΔH_f^0 , ΔG_f^0 and boiling points of AsX_3 compounds are presented in the Table 1.

Table 1. $\lg(\Delta_{\text{ANB}})$, E^* , ΔH_f^0 , ΔG_f^0 and boiling points of AsX_3

Compound	AsF_3	AsCl_3	AsBr_3	AsI_3
$\lg(\Delta_{\text{ANB}})$	3,89	5,20	6,15	6,71
E^* ,kJ/mol	1392	679	626	540
ΔH_f^0 kJ/mol	-921	-305	-198	-58
ΔG_f^0 kJ/mol	-908	-268	-162	-66
B.p., $^{\circ}\text{C}$	57	130	221	403

Four correlation equations were constructed on computer:

$$E = -55,8 \lg(\Delta_{\text{ANB}}) + 969,0 \quad (4)$$

$$\Delta H_f^0 = 112,6 \lg(\Delta_{\text{ANB}}) - 891,0 \quad (5)$$

$$\Delta G_f^0 = 111,6 \lg(\Delta_{\text{ANB}}) - 848,3 \quad (6)$$

$$\text{B.p.} = 95,8 \lg(\Delta_{\text{ANB}}) - 368,2 \quad (7)$$

Correlation coefficient r is correspondingly equal to: 0,986; 0,987; 0,987; 0,984. Thus, according Japhe's criteions [5], the correlations are satisfactory.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

8. G.Gamziani. Mathematical Chemistry. Tbilisi, 1990. p. 93 (25-55).
9. M. Gverdtsiteli, G. Gamziani, I. Gverdtsiteli. The contiguity matrices of molecular graphs and their modifications. Tbilisi, 1996.
10. K.Kupatadze, T.Lobzhanidze, M.Gverdtsiteli. Algebraic-chemical Investigation of some Organic Molecules and their Transformations. Tbilisi, Publ. House "Universal", 2007. p.21.
11. N.Akhmetov. General and Inorganic Chemistry. Moscow, Mir, 1983, p.670 (389-390).
12. მკვერდწითელი. ფიზიკური ორგანული ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, თსუ გამომცემლობა, 1982, გვ. 19.

დარიშხანის (III) ჰალოგენიდების მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა

ქეთევან კუპატაძე, მაია რუსია*, მიხეილ გვერდწითელი*

ილიას სახელმწიფო უნივერსიტეტი

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რეზიუმე

მათემატიკურ-ქიმიურად შესწავლილია დარიშხანის (III) ჰალოგენიდები ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. გებულია და გამოკვლეულია ოთხი კორელაციური განტოლება. კორელაციები დამაკმაყოფილებელია.

МАТЕМАТИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЛОГЕНИДОВ МЫШЬЯКА (III) В РАМКАХ МЕТОДА АНС-МАТРИЦ

К.Т.Купатадзе, М.Ш.Русия*, М.И.Гвердцители*

Государственный университет им И.Чавчаваძე

*Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

В рамках метода АНС-матриц проведено математико-химическое изучение галогенидов мышьяка (III). Построены и исследованы четыре корреляционных уравнения. Корреляции удовлетворительны.

მაღალმოლეკულურ ნაერთთა ქიმია

ქიმიური მეთოდით ბრაფიტის ფხვნილის სპილენძით პლაკირების პროცესის შესწავლა

გივი პაპავა, ვიტალი შეროზია, ნორა დოსტურიშვილი, ია ჩიტრეკაშვილი, მარინა გურგენიშვილი, რუსუდან ცისკარიშვილი, შალვა პაპავა, რივა ლიპარტელიანი, ნანული ხოტენაშვილი

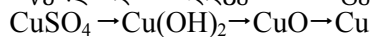
*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

შესწავლილია გრაფიტის დისპერსული ფხვნილის სპილენძით პლაკირების პროცესი სპილენძის მარილის გამოყენებით. ნაჩვენებია, რომ ეს პროცესი სამსტადიანია. პირველი სტადია მოიცავს გრაფიტის ფხვნილის ზედაპირზე სპილენძის ჰიდროქსიდის დანაფარის მიღებას, მეორე – მის გარდაქმნას სპილენძის ორვალენტთან ოქსიდად, ხოლო მესამე ამ ოქსიდის აღდგენას სპილენძამდე. მიღებულია შედეგები ამ პროცესის ყველა ძირითადი პარამეტრების პლაკირების ხარისხზე გავლენის შესახებ.

სპილენძ-გრაფიტის საფუძველზე მიღებულ მასალებს ფართო პრაქტიკული გამოყენება აქვთ მანქანათმშენებლობის სხვადასხვა სფეროში [1-3]. ტექნიკის განვითარებასთან ერთად იზრდება მოთხოვნილება ახალი, გაუმჯობესებული თვისებების მქონე მასალებზე [4]. იმის გამო, რომ გრაფიტის მექანიკური სიმტკიცე დაბალია, მისი შემცველობა სპილენძ-გრაფიტის მასალებში ჩვეულებრივ შეზღუდულია 5-7%-მდე, რაც არასაკმარისია მაღალი საექსპლუატაციო თვისებების მქონე სხვადასხვა დანიშნულების კვანძების მისაღებად [5]. გრაფიტის და სპილენძის მნიშვნელოვნად განსხვავებული კუთრი წონის გამო მათი, ფხვნილების მექანიკური შერევით მიღებულ კომპოზიტებში კომპონენტები არათანაბრად განაწილებული, რაც აუარესებს მასალის თვისებებს.

ამ პრობლემის დაძლევა შესაძლებელია სპილენძის და გრაფიტის ფხვნილების მექანიკური ნარევის ნაცვლად სპილენძით წინასწარ პლაკირებული გრაფიტის ფხვნილის გამოყენებით, რაც ამავე დროს იძლევა გრაფიტის კონცენტრაციის დიდ დიაპაზონში (10-85%, 40 მკმ დისპერსიულობის გრაფიტის ფხვნილისთვის 0,5-10 მკმ სისქის დანაფარი) ცვლილების საშუალებას.

ცნობილია, რომ მეტალური ფხვნილების მიღების ყველაზე გავრცელებული, მაღალეკონომიური და მწარმოებლური მეთოდი ოქსიდებიდან მათი აღდგენა [6], რაც შეიძლება განხორციელდეს როგორც მყარი (C), ასევე აირიანი (CO, H₂ და სხვა) აღმდგენელებით. ნახშირბადშემცველი აღმდგენელების გამოყენებას ის ნაკლი აქვს, რომ აღდგენა მიმდინარეობს მაღალ ტემპერატურაზე და რიგ შემთხვევაში იწვევს ლითონის ფხვნილის ნაწილაკების ზედაპირის ნახშირბადთან ქიმიურ ურთიერთმოქმედებას, რაც აძნელებს ასეთი ფხვნილების შემდგომში მონოლითად გადაამუშავებას. ეს გამორიცხულია წყალბადის გამოყენების შემთხვევაში. ამასთან, მიღებული ფხვნილის ზედაპირი აქტივირებულია და შემდგომში კარგად გადაამუშავდება მონოლითად დაწნევის, აფეთქებით და შეცხობით. ამიტომ, ჩვენს მიერ შერჩეული იქნა გრაფიტის სპილენძით პლაკირების ისეთი მეთოდი, რომლის ბოლო სტადიას წარმოადგენს წყალბადით აღდგენა. პროცესი მიმდინარეობს სტადიებად:



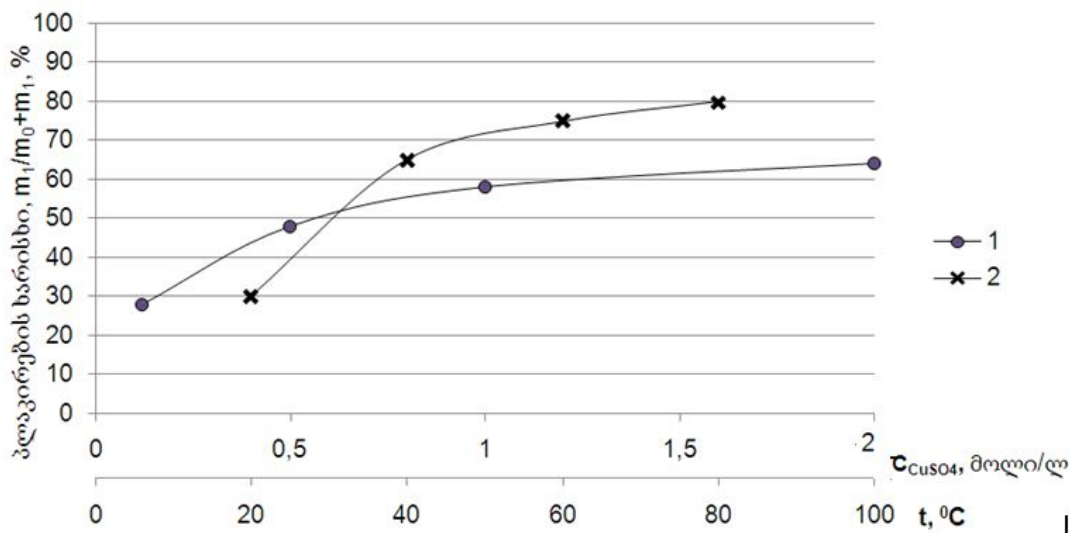
ქიმიური მეთოდით მოცულობით ნაკეთობებზე და ზოგიერთი ძნელადდნობადი მასალების ფხვნილების ზედაპირზე სპილენძის დანაფარის მიღება ცნობილია ლიტერატურაში [7,8]. ის მარტივია, არ არის ენერგოტევადი და უზრუნველყოფს ფხვნილების ზედაპირის თანაბრად პლაკირებას. მაგრამ მონაცემები ამ მეთოდით გრაფიტის ფხვნილის პლაკირების შესახებ ლიტერატურაში არ მოიპოვება. ამიტომ, გრაფიტის ფხვნილის სპილენძით პლაკირების ოპტიმალური ტექნოლოგიური პარამეტრების დასადგენად ჩატარდა ამ გარდაქმნების კვლევა.

გამოყენებული იყო 40-60 მკმ დისპერსიულობის გრაფიტის ფხვნილი და სპილენძის შემცველი მარილი. სპილენძის ოქსიდის აღდგენა სპილენძამდე ხორციელდებოდა კვარცის მილისებრ ღუმელში. ტემპერატურა იზომებოდა ვერცხლისწყლის თერმომეტრით. წყალბადის გასუფთავება ხდებოდა მისი გოგირდშავაში და აღმდგენელ სვეტში გატარებით. დანაფარის ფაზური შემადგენლობა განისაზღვრებოდა რენტგენულ დიფრაქტომეტრზე $\text{Dron-3 CuK}\alpha$ გამოსხივების პირობებში.

ექსპერიმენტები ტარდებოდა შემდგენაირად: ოთხეულ კოლბაში, რომელსაც მორგებული ჰქონდა უკუმაცივარი, მექანიკური სარეველა, თერმომეტრი და ძაბრი, ვათავსებდით გრაფიტის ფხვნილს და CuSO_4 -ის წყალხსნარს. ვურევდით სარეველათი მარილის სრულ გახსნამდე. ტემპერატურას

ვზრდილით საჭირო ღონემდე და მუდმივი მორევის პირობებში ვუმატებდით NaOH-ის წყალხსნარს. ექსპერიმენტის დამთავრებისა და ხსნარის გაცივების შამდე კოლბის ფსკერზე დალექილი სპილენძის ჰიდროქსიდით პლაკირებული გრაფიტის ფხვნილი გადაგვქონდა ბიუნხერის ძაბრზე და ვრეცხავდით დისტილირებული წყლით ფილტრატის pH=7 მნიშვნელობამდე და სულფატ იონის სრულ მოცილებამდე, რომლის კონტროლი ხორციელდება ბარიუმის ქლორიდის წყალხსნარით, რის შემდეგაც ვაშრობდით ჰაერზე 24 სთ-ის განმავლობაში.

ნახაზზე 1 მოცემულია გრაფიტის სპილენძის ჰიდროქსიდით პლაკირების ხარისხის დამოკიდებულება ხსნარის კონცენტრაციაზე და ტემპერატურაზე.



ნახ. 1. გრაფიტის სპილენძის ჰიდროქსიდით პლაკირების ხარისხის დამოკიდებულება ელექტროლიტის ხსნარის კონცენტრაციაზე (1) და ტემპერატურაზე (2).

1 - $t=30^{\circ}C$, $\tau=30$ წთ, $C_{NaOH}/C_{CuSO_4}=2$; 2 - $C_{CuSO_4}=0,5$ მოლი/ლ, $\tau=30$ წთ,

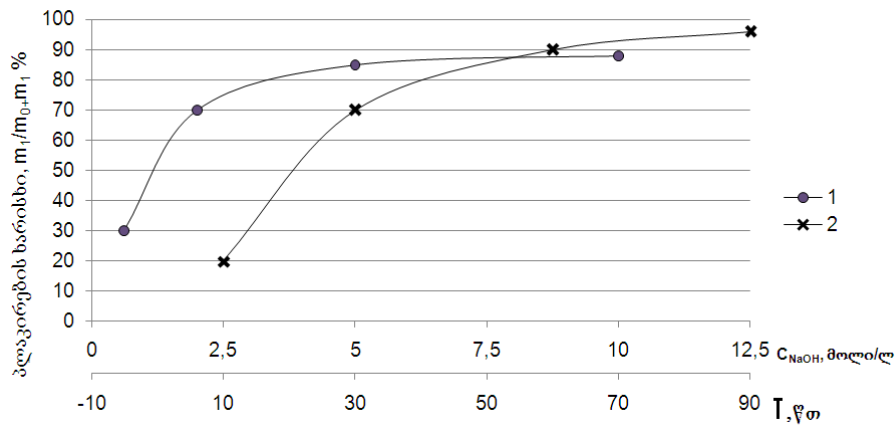
$C_{NaOH}/C_{CuSO_4}=2$. m_0 -სპილენძის რაოდენობა ხსნარში, m_1 -სპილენძის რაოდენობა დანაფარში.

როგორც მიღებული შედეგებიდან ჩანს, სპილენძის სულფატის კონცენტრაციის გაზრდით პლაკირების ხარისხი საწყის სტადიაზე მნიშვნელოვნად იზრდება. როდესაც ხსნარის კონცენტრაცია არის 0,1 მოლი/ლ, პლაკირების ხარისხი შეადგენს 28-30%-ს. კონცენტრაციის გაზრდისას 1 მოლი/ლ-მდე იგი აღწევს 60%-ს. ამის შემდეგ კონცენტრაციის გაზრდისას პლაკირების ხარისხი უმნიშვნელოდ იზრდება და 2 მოლი/ლ კონცენტრაციის დროს აღწევს მხოლოდ 62%-ს. 20-60°C ტემპერატურულ ინტერვალში პლაკირების ხარისხი წრფივად იზრდება, მხოლოდ შემდეგ შეინიშნება მისი ზრდის სიჩქარის შემცირება. ყველა ექსპერიმენტებში ხსნარში ტუტის მოლური კონცენტრაცია რამდენადმე აღემატება სტექიომეტრიულს ($C_{NaOH}/C_{CuSO_4}=2$).

როგორც ნახაზიდან 2 ჩანს ხსნარში ტუტის რაოდენობის ცვლილება მნიშვნელოვნად ცვლის გარდაქმნის ხარისხს.

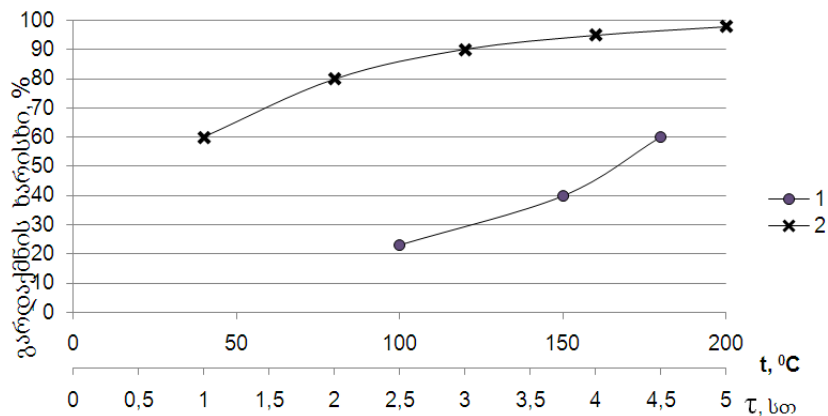
როდესაც ტუტის რაოდენობა არის 0,5 მოლი, გარდაქმნის ხარისხი შეადგენს მხოლოდ 30%-ს. ექვიმოლუკულური რაოდენობით ტუტის მიმატებისას, პლაკირების ხარისხი აღწევს 75%-მდე. ტუტის რაოდენობის შემდგომი მომატებით მნიშვნელოვნად იზრდება პლაკირების ხარისხი. როდესაც ტუტის რაოდენობა შეადგენს 5 მოლს, პლაკირების ხარისხი იზრდება 98%-მდე. ტუტის რაოდენობის შემდგომი მატებისას პლაკირების ხარისხი უმნიშვნელოდ იზრდება. იმავე ნახ.-ზე მოცემულია პლაკირების ხარისხის დამოკიდებულება დროზე. პროცესის ჩატარება 30-45 წთ-ის განმავლობაში უზრუნველყოფს სულფატის, ფაქტობრივად, მთლიანად გარდაქმნას ჰიდროქსიდად.

სპილენძის ჰიდროქსიდი არასტაბილური ნაერთია. ლიტერატურიდან ცნობილია, რომ მიღების წესისა და შენახვის ტემპერატურისგან დამოკიდებულებით ის განიცდის რადეჰიდრატაციას, გარდაიქმნება სპილენძის ოქსიდად CuO . ამისათვის $30^{\circ}C$ ტემპერატურაზე საკმარისია 86სთ დაყოვნება [9]. მაგრამ საწარმოო მასშტაბით გამოყენებისას ეს ქმნის რიგ სიძნეელებს. ამიტომ ჩვენს მიერ შესწავლილი იქნა გრაფიტის ფხვნილზე დანაფარის სახით არსებული სპილენძის ჰიდროქსიდის სპილენძის ოქსიდად დაჩქარებული წესით გარდაქმნის პროცესი.



ნახ. 2. გრაფიტის სპილენძის ჰიდროქსიდით პლაკირების ხარისხის დამოკიდებულება ელექტროლიტის ხსნარში NaOH რაოდენობაზე (1) და პროცესის ხანგრძლივობაზე (2).
 1- $t=60^{\circ}C$, $\tau=30$ წთ; $C_{CuSO_4}=0,5$ მოლი/ლ; 2- $t=60^{\circ}C$, $C_{CuSO_4}=0,5$ მოლი/ლ, $C_{NaOH}/C_{CuSO_4}=2$. m_0 -სპილენძის რაოდენობა ხსნარში, m_1 -სპილენძის რაოდენობა დანაფარში.

როგორც ნახაზიდან 3 ჩანს, ინერტულ არეში $180^{\circ}C$ ტემპერატურაზე 4 სთ-ის განმავლობაში იზოთერმული დამუშავება სრულიად საკმარისია გრაფიტზე არსებული სპილენძის ჰიდროქსიდის 95-98%-ის ორგანული სპილენძის ოქსიდად გარდასაქმნელად. რენტგენოფაზურმა ანალიზმა აჩვენა, რომ წარმოქმნილი CuO კრისტალური სტრუქტურისაა. (ნახ. 4).

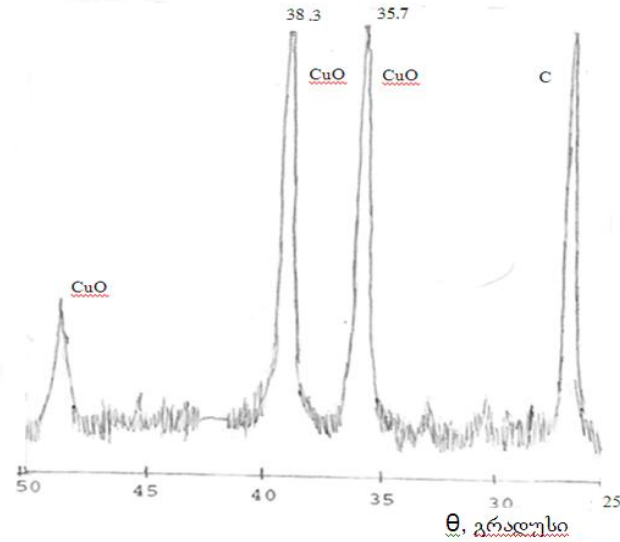


ნახ. 3. სპილენძის ჰიდროქსიდის სპილენძის ფანგად გარდაქმნის ხარისხის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე ($\tau=1$ სთ) (1) და პროცესის ხანგრძლივობაზე ($t=180^{\circ}C$), (2).

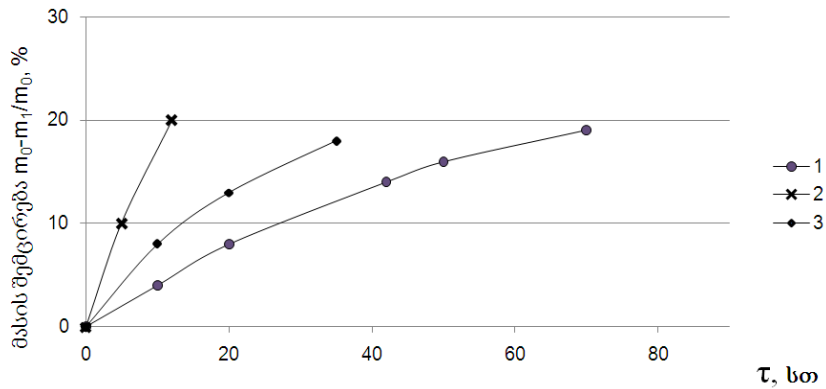
სპილენძის აღდგენა მიმდინარეობდა წყალბადის არეში. წყალბადის ნაკადის სიჩქარე დამოკიდებული იყო აღსადგენი დანაფარის მასაზე (დანაფარის სისქეზე) და იცვლებოდა 1-5 ლ/სთ ინტერვალში. აღდგენის ხარისხის კონტროლი ხორციელდებოდა მასის შემცირებით და რენტგენოფაზური ანალიზით. ექსპერიმენტები ჩატარდა მინიმალური (0,5-1,0 მკმ, 15მას% CuO), მაქსიმალური (8-12 მკმ, 85მას% CuO) და შუალედური (4-6მკმ, 50 მას.% CuO) სპილენძის ოქსიდით პლაკირებული გრაფიტის ფხვნილის გამოყენებით $140^{\circ}C$, $180^{\circ}C$, $220^{\circ}C$ და $240^{\circ}C$ ტემპერატურაზე. $220^{\circ}C$ ტემპერატურის ზემოთ აღდგენის ჩატარება არ არის მიზანშეწონილი სპილენძით პლაკირებული გრაფიტის მარცვლების ურთიერთშეცხობის გამო. დაბალ ტემპერატურაზე პროცესი მიმდინარეობს ძალიან დაბალი სიჩქარით. ამიტომ, აღდგენის სიჩქარის დამოკიდებულება დროზე შესწავლილ იქნა მხოლოდ $220^{\circ}C$ -ზე. იზოთერმულ პირობებში გახურება ხორციელდებოდა $20^{\circ}C$ /წთ სიჩქარით. აღდგენილი ფხვნილი ცივდებოდა ღუმელთან ერთად წყალბადის ნაკადში. მიღებული შედეგები მოცემულია ნახაზზე 5.

როგორც ჩანს, დანაფარის სრულად აღსადგენად საჭიროა ხანგრძლივი პერიოდი, რადგან ის ლიმიტირებულია წყალბადის დიფუზიით მყარ CuO ფაზაში. 8-12მკმ სისქის დანაფარისთვის აღდგენის პროცესის დასასრულებლად საჭიროა 70- 75 სთ. 0.5 -1,0 მკმ სისქის დანაფარისთვის მისი დასრულება შესაძლებელია 8-10 სთ-ში. რენტგენოფაზური ანალიზით დადასტურდა CuO ფაზის

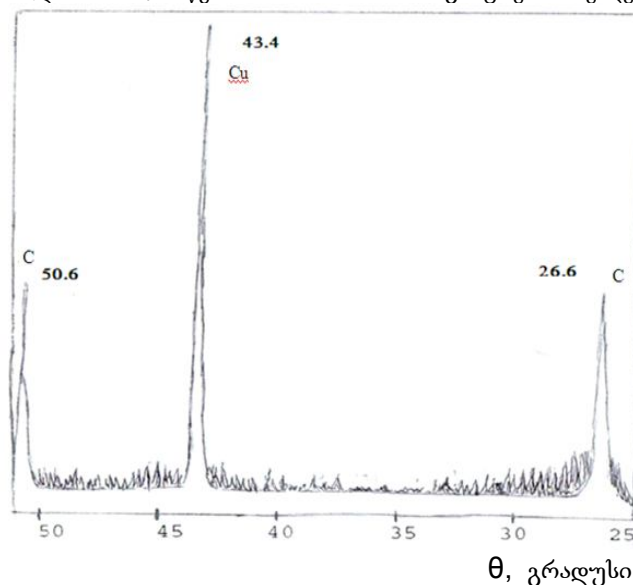
დანაფარის მასის 20%-იანი კლების შემდგომ მისი სრულად გარდაქმნა სპილენძის დანაფარად (ნახ.6). მიკროსკოპულმა ანალიზმა აჩვენა, რომ მიღებულ ფხვნილს, განსაკუთრებით მაღალი სისქისას, აქვს დენდრიტული სტრუქტურა.



ნახ. 4. სპილენძის ჰიდროქსიდით დაფარული გრაფიტის ფხვნილის რენტგენოგრამა 180°C ტემპერატურაზე 5 სთ-ის განმავლობაში გახურების შედეგ



ნახ. 5. 85%მას. CuO (1), 15%მას. CuO (2), 50%მას. CuO (3) დანაფარიანი გრაფიტის ფხვნილის მასის შემცირების დამოკიდებულება დროზე 220°C ტემპერატურაზე გახურებისას. V₂=5 ლ/სთ. m₀-საწყისი მასა, m₁-მასა გახურების შემდეგ.



ნახ. 6. 15%მას. CuO დაფარული გრაფიტის ფხვნილის რენტგენოგრამა წყალბადის არეში 220°C ტემპერატურაზე 10 სთ-ის განმავლობაში გახურების შედეგ

კვლევებმა აჩვენა, რომ 40მკმ-ზე ნაკლები დისპერსიულობის გრაფიტის ფხვნილის პლაკირებისას ყველა ის კანონზომიერებები შენარჩუნებულია, რომელიც შეინიშნებოდა 40 - 60 მკმ ფხვნილის პლაკირებისას. მხოლოდ $\text{Cu}(\text{OH})_2$ -ით პლაკირების ხარისხი და CuO -ს ალდგენის სიჩქარეა შედარებით მაღალი, რაც, ალბათ, ამ ფხვნილის განსხვავებულ გრანულომეტრიულ შემადგენლობასთან, კერძოდ, უფრო დიდი კუთრი ფართის ფხვნილის არსებობასთან არის დაკავშირებული.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Меднографитовые втулки МГр90-2. <http://www.ssrp.ru/sale/?&s=7691>.
2. Copper Grafite Electrical Brushes and Brush Materials Datasheets. http://www.globalspec.com/datasheets/3914/areaspec/material_CuC.
3. Меднографитовые антифрикционные пластины. <http://promportal.su/201754.htm>
4. Современные проблемы машиностроения. /Труды V международной научно-технической конференции. -Томск, Россия, 23-26 ноября 2010.
5. Pagina L.I. , Fedorchenko I.M. and Ponomarenko N.E. Effect of graphite content on the antifricition properties of metallographite materials. Translated from Poroshkovaya ,Metallurgiya ,#9(33),1965.
6. Химические и физико-химические методы получения порошков. <http://dailycomp.ru/chernaya-metallurgiya/154-himicheskie-i-fiziko-himicheskie-metody-polucheniya-poroshkov.htm>.
7. Ващенко В. В., Голубев О.Н., Светухин С.П. и др. Плакирование порошков тугоплавких соединений методами химического осаждения //Труды 11го Всесоюз. совещан. по жаростойким покрытиям. - Тула, -Л.: Наука, 1985, с. 131-134.
8. Химические покрытия. <http://opozit.ru/article1639.html>.
9. Чалый В.П. Гидроокиси металлов. –Киев, Наукова думка, 1972.

INVESTIGATION OF CLADDING PROCESS OF GRAPHITE POWDER WITH COPPER BY CHEMICAL METHOD

Givi Papava, Vitali Sherozia, Nora Dokhturashvili, Ia Chitrekashvili, Marina Gurgenishvili, Rusudan Tsiskarishvili, Shalva Papava, Riva Liparteliani, Nanuli Khotenashvili

*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

The article deals with the process of plating with graphite powder copper by using copper salt. The process is three-stage. The first stage consists in deposition of a copper dioxide layer on the graphite powder surface, the second – in its transformation into copper oxide, the third – in reduction of this oxide to crystalline copper. The results of investigation of the effect of the parameters of abovementioned processes on the plating quality are presented.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ПЛАКИРОВАНИЯ МЕДЬЮ ПОРОШКА ГРАФИТА ХИМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Г.Ш.Папава, В.А.Шерозиа, Н.С.Дохтуришвили, И.А.Читрекашвили, М.Б.Гургенишвили, Р.П.Цискаришвили, Ш.Р.Папава, Р.Липартелиани, Н.Хотенашвили

*Институт физической и органической химии им. Петре Меликишвили
Тбилисского Государственного Университета им. Ив. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Изучен процесс плакирования медью диспергированного порошка графита, использованием соли меди. Показано, что процесс является трехстадийным. Первая стадия включает получение покрытия гидроксида меди, вторая – его превращения в двухвалентный оксид, третья – восстановление оксида до меди. Получены результаты о влияния основных параметров всех вышеуказанных процессов на степень плакирования.

მაღალმოლეკულურ ნაერთთა ქიმია

ნოვოლაქის ტიპის პოლიმერული კომპოზიციები და პლასტიკური მასალები მათ საფუძველზე

გივი პაპავა, ნაზი გელაშვილი, ეთერ გავაშელიძე, ნუნუ მაისურაძე, ნორა დოხტურიშვილი, ზურაბ თაბუკაშვილი, ნელი მაისურაძე*

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

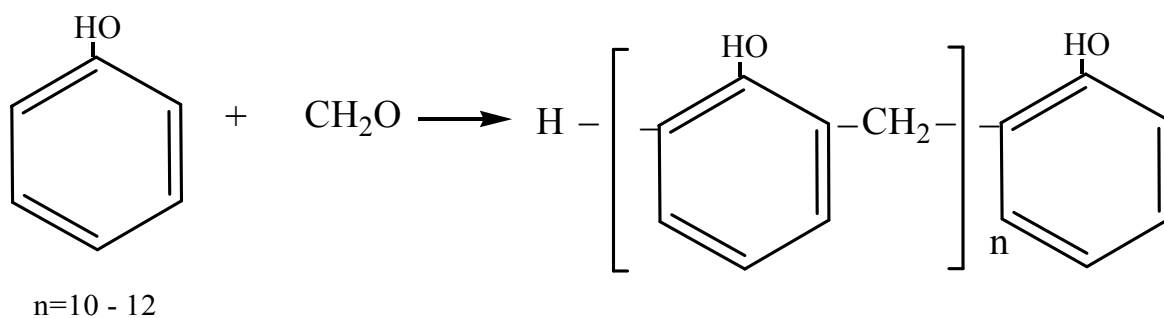
მინერალური ნედლეულის – დიატომიტის და ნოვოლაქის ტიპის ოლიგომერების საფუძველზე მიღებულია პოლიმერული კომპოზიციები, ხოლო მათი თერმული გადამუშავებით – პლასტიკური მასალები, შესწავლილია მათი ფიზიკურ-მექანიკური და დიელექტრული თვისებები, დადგენილია დიატომიტის ოპტიმალური შემცველობა.

სივრცითი სტრუქტურის მქონე თბო- და თერმომდეგე პოლიმერებს შორის თავისი პრაქტიკული მნიშვნელობით განსაკუთრებული ადგილი უკავია ფენოლ – ალდეჰიდური ტიპის პლასტიკურ მასალებს.

სამუშაოს ამოცანას შეადგენდა არაორგანული ბუნებრივი მინერალური ნედლეულის – დიატომიტის და ნოვოლაქის ტიპის ოლიგომერების საფუძველზე პოლიმერული კომპოზიციების და მათი გადამუშავებით მიღებული პლასტიკური მასალების კვლევა.

დიატომიტის გამოყენება ერთერთ ძირითად კომპონენტად, პოლიმერულ კომპოზიციაში პოლიმერის წვლილის მნიშვნელოვნად შემცირებისა და პლასტიკური მასალების გააფხვების საშუალებას იძლევა.

ნოვოლაქური ოლიგომერი მიიღება ფორმალდეჰიდისა და ოქსიბენზოლის ურთიერთმოქმედებით [1,2]. რეაქცია მიმდინარეობს შემდეგი სქემის მიხედვით:



პრაქტიკულად დიატომიტის შემცველი ნოვოლაქის ტიპის პოლიმერული კომპოზიცია შემდგენიარად მიიღება: ოქსიბენზოლი ურთიერთმოქმედებს ფორმალდეჰიდის წყალხსნართან; ოლიგომერი, რომელიც ირეცხება, წყლით აშრობენ და ფქვავენ. მეორე ძირითადი კომპონენტი – დიატომიტი იქვე ემატება, შემდეგ კი ხდება მიღებული კომპოზიციის თერმული გადამუშავება კომპრესული დაწნევით.

პოლიმერულ კომპოზიციებში ერთერთ ძირითად კომპონენტად დიატომიტის გამოყენება განპირობებულია დიატომიტის ძვირფასი თვისებებით. საქართველოს გააჩნია უმაღლესი ხარისხის დიატომიტის დიდი მარაგი.

მიღებულია მაღალი ხარისხით შევსებული პოლიმერული კომპოზიციები, რომლებიც შეიცავენ 30–80 მას.% ბუნებრივ დიატომიტს. მათი თერმული გადამუშავებისათვის დადგენილია ძირითადი ტექნოლოგიური პარამეტრები: ტემპერატურა 180⁰C, ხვედრითი წნევა 60 მპა, დაყოვნების დრო 40 წმ ნაკეთობის 1მმ სისქეზე.

შესწავლილია მიღებული პლასტიკური მასალების ფიზიკურ-მექანიკური და დიელექტრიკული მაჩვენებლები. შედეგები მოცემულია ცხრილში 1.

ცხრილის მონაცემებიდან ჩანს, რომ მიღებული პლასტიკური მასალების თვისებებზე გავლენას ახდენს კომპოზიციაში დიატომიტის შემცველობა. 30 მას.% დიატომიტის შემცველ კომპოზიტს აქვს შედარებით დაბალი მაჩვენებლები დარტყმით სიმტკიცეზე და დიელექტრიკული მაჩვენებლებიც შედარებით დაბალია. როდესაც პოლიმერულ კომპოზიციაში დიატომიტის შემცველობა 80 მას.%-მდეა, მისი მექანიკური და დიელექტრიკული თვისებები უმჯობესდება, მაგრამ დენადობა მნიშვნელოვნად მცირდება, რაც აძნელებს პოლიმერული კომპოზიციების გადამუშავებას.

ცხრილი 1. ნოვოლაქური ოლიგომერისა და დიატომიტის საფუძველზე მიღებული პლასტიკური მასალების ფიზიკურ – მექანიკური და დიელექტრიკული თვისებები

მაჩვენებლის დასახელება	დიატომიტის შემცველობა კომპოზიციაში, მას.%				მარკა 09-200-02
	30	40	60	80	
დენადობა, მმ	12,0 – 19,0	10,0 – 17,0	10,0 - 17,0	12,0- 19,0	14-20
ლუნვის დროს მრღვევი დაძაბულობა, მპა	600	707	600	600	62,7 (610)
იელექტრიკული სიმტკიცე, კვ/მმ	–	14,0	14,0	16,0	13,00
დიელექტრიკული დანაკარგის კუთხის ტანგენსი 50ჰც სიხშირის დროს	–	–	–	0,06	–
კუთრი ზედაპირული წინაღობა, ომი	–	1,10 ¹³	10.10 ¹³	5.10 ¹⁴	1 · 10 ¹²
დარტყმითი სიბლანტე ნიმუშზე, რომელსაც ჩანაჭერი არ აქვს კვ/მ2	4,5	5,8	5,0	5,5	4,9 (5,00)
თბომდეგობა მარტენსის მიხედვით, °C	120	130	130	140	130
კუთრი მოცულობითი ელ.წინაღობა, ომი	–	1.10 ¹²	1.10 ¹²	2.10 ¹³	1 · 10 ¹¹

გამოკვლევების შედეგად დადგენილია, რომ ოპტიმალური შედეგებისაა ისეთი კომპოზიციები, რომლებშიც დიატომიტის შემცველობა 40 – 60 მას.%-მდეა. ნაკეთობები, რომლებიც ასეთი პოლიმერული კომპოზიციების საფუძველზეა მიღებული, რიგ შემთხვევაში მნიშვნელოვნად უკეთესი მაჩვენებლებით ხასიათდებიან დღეისათვის ცნობილ სამრეწველო ანალოგიური დანიშნულების პოლიმერული კომპოზიციების საფუძველზე მიღებულ ნაკეთობებთან შედარებით.

პოლიმერულ კომპოზიციებში შესაძლებელი გახდა მთლიანად შეგვეცვალა ძვირადღირებული და დეფიციტური შემავსებლები უფრო იაფი და ხელმისაწვდომი ადგილობრივი ბუნებრივი ნედლეულით – დიატომიტით.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. А.Ф.Николаев. Синтетические полимеры и пластические массы на их основе. Изд-во «Химия», Л., ст.423, 1964.
2. А. М. Торопцева. К. В. Белгородская, В. М. Бондаренко. Лабораторный практикум по химии и технологии высокомолекулярных соединений, Изд-во «Химия», Л., ст. 199 – 200; 204-205, 1972г.

NOVOLAK TYPE POLUMER COMPOSITIONS

Givi Papava, Nazi Gelashvili, Eter Gavashelidze, Nunu Maisuradze, Nora Dokhturishvili,
Zurab Tabukashvili, Neli Maisuradze*

*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
of Ivane Javakishvili Tbilisi State University
Georgian Texnikal University

SUMMARY

Plastics were obtained by thermal structuring of the composite based on novolac oligomer and inorganic natural mineral raw material – diatomite. Their physico-mechanical and dielectric properties were studied. It was established, that the optimum composition of the composites are the composites in which the content of diatomites is 40-60 mas.%. Products derived on the base of such polymer composites on the base of such polymer composites in some cases have significantly better performance compared to the presently known industrial plastics for similar purpose.

ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИЦИИ ТИПА НОВОЛАКА И ПЛАСТМАССЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Г.Ш.Папава, Н.С.Гелашвили, Э.Ш.Гавашелидзе, Н.А.Маисурадзе, Н.С.Дохтуришвили,
Н.А.Маисурадзе*

*Институт физической и органической химии им. П.Меликишвили
Тбилисского Государственного Университета им. Ив. Джавахишвили
Грузинский технический университет

РЕЗЮМЕ

Путём термической переработки компрессионным прессованием получены пластические массы на основе полимерных композиций новолачного типа, содержащие в качестве наполнителя минеральное сырьё - диатомит. Изучены их физико – механические и диэлектрические свойства. Установлено, что оптимальным является содержание диатомита в композиции 40 – 60 мас.%. Изделия, которые получены на основе таких полимерных композиций в ряде случаев характеризуются улучшенными физико–механическими и диэлектрическими показателями, по сравнению с известными промышленными образцами аналогичного типа.

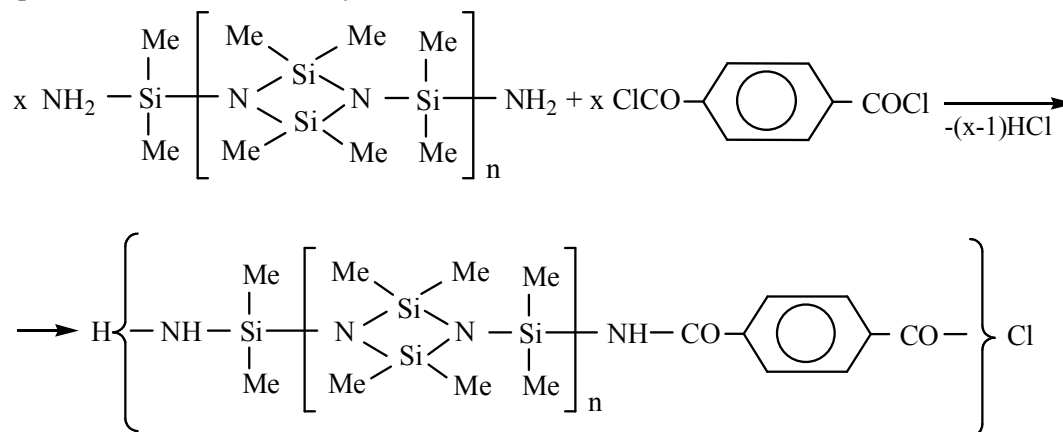
ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

ГЕТЕРОФУНКЦИОНАЛЬНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ α,ω -БИС(АМИНОДИМЕТИЛСИЛИЛ)-ТЕТРАМЕТИЛЦИКЛОДИСИЛАЗАНОВ С ДИХЛОРАНГИДРИДОМ ТЕРЕФТАЛЕВОЙ КИСЛОТЫ И α,ω -БИС(β -КАРБОКСИЭТИЛ)ДИМЕТИЛСИЛОКСАНАМИ

Л.К.Джаниашвили, Г.Г.Андроникашвили*, А.Ш.Варадашвили
 Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили
 *Телавский государственный университет

В полимерной химии важной задачей является синтез перерабатываемых полимеров с высокой тепло- и термостойкостью. С этой точки зрения, несомненный интерес представляют сополимеры с органоциклодисилазановыми фрагментами в макромолекулярной цепи. Циклодисилазановые полимеры обладают высокой упругостью, хорошими антиадгезионными свойствами.

С целью синтеза термостойких полимеров нами осуществлена гетерофункциональная конденсация α,ω -бис(аминодиметилсилил)тетраметилциклодисилазанов с дихлорангидридом терефталевой кислоты по следующей схеме:



где $n=1$ (1); $n=2$ (2).

Гетерофункциональную конденсацию (ГФК) проводили в кипящем диметилформамиде (ДМФА), в атмосфере азота при эквимолярном соотношении исходных компонентов в течение 5-6 часов.

За ходом реакции следили по выделению хлористого водорода (рис. 1). Наблюдение за ходом реакции ГФК по изменению удельной вязкости 1%-ного раствора в бензоле и выделением хлористого водорода во времени показало, что вязкость продукта поликонденсации возрастает в соответствии с увеличением количества выделившегося хлористого водорода.

Синтезированные сополимеры эластичные продукты светлого цвета, хорошо растворяющийся в органических растворителях. Температуры размягчения для полимеров и с четным числом циклодисилазановых звеньев (при $n=2$, $T_{\text{разм.}}=99^{\circ}\text{C}$) ниже, чем для полимеров с нечетным числом циклодисилазановых звеньев цепи (при $n=1$, $T_{\text{разм.}}=127^{\circ}\text{C}$). Эластичность, а также растворимость в ароматических растворителях увеличиваются с ростом n .

Газожидкостный хроматографический анализ продуктов реакции показал, что исходные соединения в конечных продуктах реакции отсутствуют.

Состав и строение синтезированных полимеров охарактеризовано элементным анализом и ИК спектрами. В ИК спектрах найдены полосы поглощения при $870\text{-}890\text{ см}^{-1}$ и $1010\text{-}1040\text{ см}^{-1}$, характерные для валентных колебаний циклодисилазанового фрагмента (для $\nu(\text{Si}_2\text{N})$ и $\nu(\text{Si}_4\text{N}_2)$, соответственно), имеются также полосы с волновыми числами 930 , 1180 , 3380 см^{-1} , соответствующие частотам валентных и деформационных колебаний связей Si-NH групп, также обнаруживаются полосы поглощения в области 1260 см^{-1} для Si-Me и в области 1600 см^{-1} для $\text{C}_{\text{ар}}-\text{C}_{\text{ар}}$ связей.

Изучена термическая стабильность синтезированных сополимеров. Данные термогравиметрического анализа (ТГА) показывают, что при температурах $360\text{-}380^{\circ}\text{C}$ начинается медленное разложение полимеров (потери массы при 360°C не выше 3%), быстрое разложение происходит при температурах $400\text{-}450^{\circ}\text{C}$.

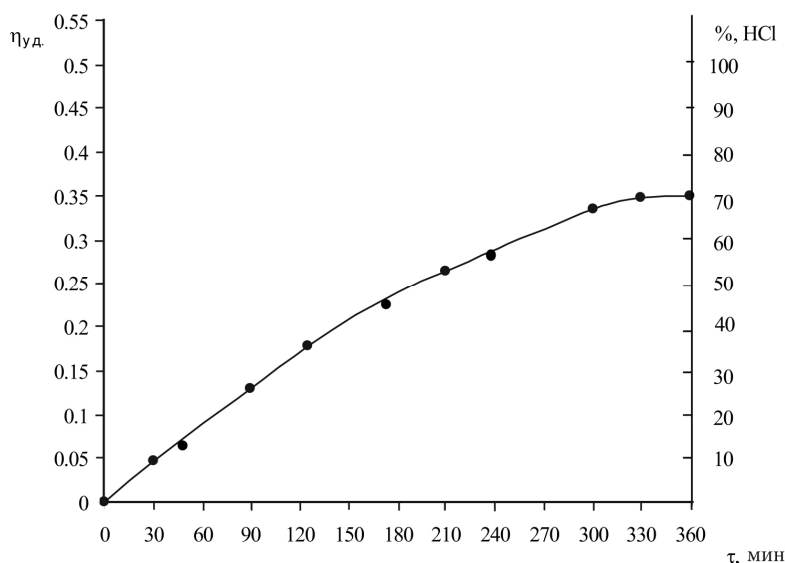
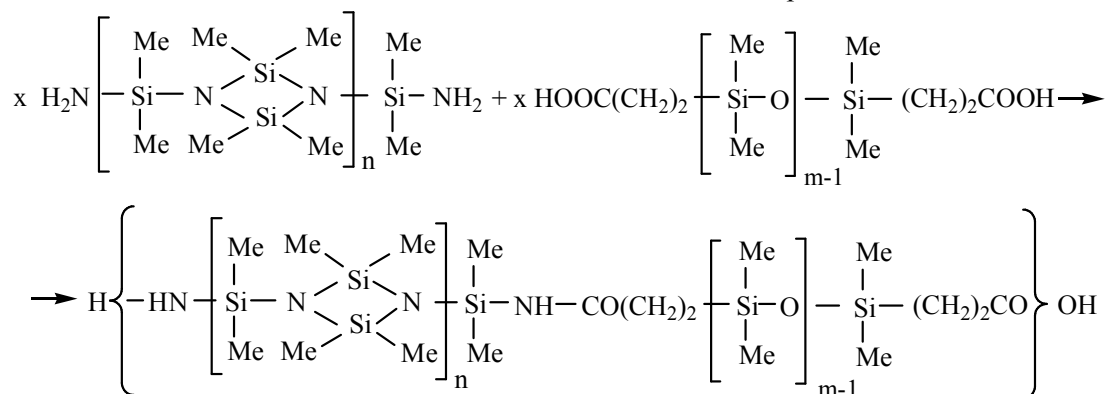


Рис. 1. Изменение удельной вязкости 1%-ного раствора сополимера **1** и количество выделившегося HCl в процессе ГФК α,ω -бис(аминодиметилсилил)тетраметилциклодисиладана с дихлорангидридом терефталевой кислоты

Нами была проведена ГФК α,ω -бис(аминодиметилсилил)тетраметилциклодисиладанов с α,ω -бис(β -карбоксиил)диметилсилоксанами в кипящей ДМФА, в атмосфере азота при эквимольном соотношении исходных компонентов в течение 10 часов. Реакция протекает по схеме:



где $n=1$, $m=10$ (**3**); $n=2$, $m=10$ (**4**); $n=1$, $m=28$ (**5**); $n=2$, $m=28$ (**6**).

Полученные сополимеры являются каучукоподобными продуктами светлого цвета. Они хорошо растворяются в ДМФА и *N*-метилпирролидоне. Синтезированные сополимеры обладают волокно- и пленкообразующими свойствами. Состав и строение синтезированных сополимеров подтверждено ИК-спектрами и данными элементного анализа.

В ИК-спектрах сополимеров **3÷6** найдены полосы поглощения при $870\text{--}890\text{ см}^{-1}$ и $1020\text{--}1040\text{ см}^{-1}$, характерные для валентных колебаний циклодисиладанового фрагмента (для $\nu(\text{Si}_2\text{N})$ и $\nu(\text{Si}_4\text{N}_2)$), также интенсивные полосы поглощения в области 1660 см^{-1} , $1000\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ и 1420 см^{-1} , характерные для CO, Si–O–Si и Si–Me связей, соответственно.

Синтезированные сополимеры **3÷6** содержат в основной цепи гибкие силоксановые и циклодисиладановые фрагменты. Сочетание различных структурных фрагментов в сополимерах отражается на физико-химических показателях этих сополимеров и прежде всего на их термомеханических свойствах. Сополимеры **5** и **6** имеют температуру стеклования в области отрицательных температур. На термомеханические свойства этих полимеров сказывается величина диметилсилоксанового блока и у сополимера **6** проявляется высокоэластичная область.

Синтезированные сополимеры обладают достаточно высокой термической стабильностью. Полимеры **3** и **4** устойчивы при температурах $430\text{--}440^\circ\text{C}$ в среде азота, а полимеры **5** и **6** устойчивы при температурах $510\text{--}560^\circ\text{C}$. При этих температурах начинается медленное разложение сополимеров (потеря массы не превышает 3-5%). На стабильность полимеров не влияет повышение доли силановых циклов в полимерах путем встройки олигомерных циклодисиладанов. Некоторые свойства и элементный анализ синтезированных сополимеров приведены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-химические данные и элементный анализ синтезированных сополимеров

№	$\eta_{\text{уд.}}$ 1%-ый р-р в бензоле при 25 ⁰ С	$T_{\text{разм.}}$ ⁰ С	Найдено/вычислено, %				Структурная единица
			С	Н	N	Si	
1.	0,33	127	$\frac{45,67}{45,5}$	$\frac{7,49}{7,11}$	$\frac{13,51}{13,27}$	$\frac{26,17}{26,54}$	C ₁₆ H ₃₀ N ₄ O ₂ Si ₄
2.	0,35	99	$\frac{42,45}{42,31}$	$\frac{8,0}{7,69}$	$\frac{13,09}{13,46}$	$\frac{31,63}{31,41}$	C ₂₂ H ₄₈ N ₆ O ₂ Si ₇
3.	0,3	255	$\frac{36,51}{36,23}$	$\frac{8,17}{8,35}$	$\frac{5,21}{4,91}$	$\frac{35,14}{34,81}$	C ₃₄ H ₉₄ N ₄ O ₁₁ Si ₁₄
4.	0,34	157	$\frac{36,45}{36,04}$	$\frac{8,79}{8,43}$	$\frac{6,21}{6,68}$	$\frac{36,27}{35,84}$	C ₄₀ H ₁₁₂ N ₆ O ₁₁ Si ₁₇
5.	0,39	298	$\frac{34,47}{34,96}$	$\frac{8,14}{8,22}$	$\frac{2,53}{2,28}$	$\frac{36,77}{36,45}$	C ₇₀ H ₂₀₂ N ₄ O ₂₉ Si ₃₂
6.	0,42	236	$\frac{34,42}{34,25}$	$\frac{7,97}{8,27}$	$\frac{3,47}{3,16}$	$\frac{36,25}{36,84}$	C ₇₆ H ₂₂₀ N ₆ O ₂₉ Si ₃₅

Экспериментальная часть

В трехгорлую колбу, снабженную мешалкой, обратным холодильником и газопроводной трубкой, помещали 2.92 г (0.01 м) α, ω -бис(аминодиметилсилил)тетраметилциклодисилазана ($n=1$) и 2.03 г (0.01 м) дихлорангидрида терефталевой кислоты, добавляли 20 мл ДМФА. Реакционную смесь нагревали при температуре 150⁰С при постоянном перемешивании в токе азота в течение 5-6 часов. Затем реакционную колбу соединяли с вакуумом. Твердую массу растворяли в смеси N-МП и 3% LiCl, переосаждали ацетоном, промывали водой, сушили в вакуум-сушильном шкафу при температуре 50⁰С в течение 15 часов. Получали 4.32 г (94%) эластичный сополимер **1** с $\eta_{\text{уд.}}=0.33$

Аналогично получали и другие сополимеры.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Peterman K.E., Shreeve J.M. Inorganic Chemistry, **1976**, 15, 743;
2. Khananashvili L.M., Akhobadze D.Sh., Seckuria J.M. Eight International Symposium of Organosilicon Chemistry; 31th JUPAK Macromolecular Symposium, DDR, **1987**, 1, 87;
3. Л.К. Джаниашвили, Г.Г. Андроникашвили, Д.Г. Отиашвили. Химический журнал Грузии, **2009**, 9, 452-454;
4. N.N. Sidamonidze, R.O. Vardiashvili, M.O. Isakadze, L.K. Janiashvili and Z.Sh. Lomtadidze. Pharmaceutical Chemistry Journal, **2007**, 41, 131-132.

α, ω -ბის(ამინოდიმეთილსილილ)ტეტრამეთილციკლოდისილაზანის ჰეტეროფუნქციონირებული კონდენსაცია ტერეფტალის მჟავას დიქლორანჰიდრიდთან და α, ω -ბის(β-კარბოქსიეთილ)დიმეთილსილოქანების მიხედვით

ლილი ჯანიშვილი, გიული ანდრონიკაშვილი*, არჩილ ვარადაშვილი
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

*თელავის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რეზიუმე

α, ω -ბის(ამინოდიმეთილსილილ)ტეტრამეთილციკლოდისილაზანის ჰეტეროფუნქციონირებული კონდენსაციით ტერეფტალის მჟავას დიქლორანჰიდრიდთან და α, ω -ბის(β-კარბოქსიეთილ)დიმეთილსილოქანების მიხედვით მიღებული ციკლოდისილაზანური ფრაგმენტის შემცველი თანაპოლიმერები.

HETEROFUNCTIONAL CONDENSATION OF α, ω -BIS(AMINODIMETHYLSILYL)TETRAMETHYL-CYCLODISILAZANES WITH DICHLORANHYDRIDE TEREPHTHALIC ACIDS

AND α, ω -BIS(β -CARBOXYETHYL)DIMETHYLSILOXANES

Lili Janiashvili, Giuli Andronikashvili*, Archil Varadashvili

I.Javakhishvili Tbilisi State University

*Telavi State University

SUMMARY

The cyclodisilazane-containing copolymers have been obtained by heterofunctional condensation of α, ω -bis(aminodimethylsilyl)tetramethylcyclodisilazanes with dichloranhydride terephthalic acids and α, ω -bis(β -carboxyethyl)dimethylsiloxanes.

კოორდინაციულ ნაერთთა ქიმია

ჰექსამეთილენტეტრამინთან (ჰმტა) ლითონთა კოორდინაციული ნაერთები

მაია ცინცაძე, აივანგო მაძულაშვილი, რევაზ კლდიაშვილი, ეკა თოფურია, თათია ტუსიაშვილი, თამარ ცინცაძე

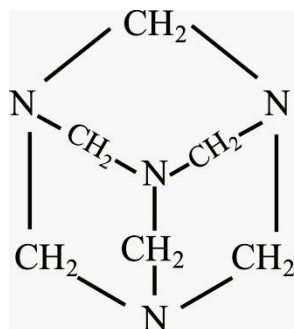
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

სინთეზირებულია Mg, Ca, Sr და Cd-ის ქლორიდების ჰექსამეთილენტეტრამინთან (ჰმტა) კოორდინაციული ნაერთები. შესწავლილია მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები და შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები. სინთეზირებული ნივთიერების შემადგენლობა დადგენილია ელემენტური ანალიზით, ხოლო ინდივიდუალობა ლობის ტემპერატურით და რენტგენოგრაფიული მეთოდით.

ჰექსამეთილენტეტრამინი (ჰმტა) თავისუფალ მდგომარეობაში არსებობს კრისტალების ან თეთრი ფერის ფხვნილის სახით. იგი კარგად იხსნება წყალსა და ეთილის სპირტში, ძნელად ეთერში. მაღალ ტემპერატურაზე გაცხელებისას გაღობის გარეშე გადადის აირად მდგომარეობაში. მისი წყალხსნარი ხასიათდება სუსტი ფუძე თვისებებით [1].

ჰექსამეთილენტეტრამინის (ჰმტა) მოლეკულას გააჩნია ოთხი ელექტრონოდონორული აზოტის ატომი, რომლებიც განლაგებულია ტეტრაედრის წვეროებში.

ჰექსამეთილენტეტრამინი (ჰმტა) კომპლექსწარმოქმნის დროს სტრუქტურული აღნაგობის თავისებურების გამო ამჟღავნებს როგორც მონო, ისე პოლიდენტატური ლიგანდის თვისებებს.



ჰექსამეთილენტეტრამინის (ჰმტა) მოლეკულა

ჰმტა-ის რენტგენოსტრუქტურულმა გამოკვლევებმა [2,3] მოგვცა ატომთაშორისი მანძილების და ვალენტური კუთხეების შემდეგი მნიშვნელობები: C-N 1,47 Å; C-H 1,088 Å; <N-C-N 113,6°; <C-N-N 107,2°.

ჩვენს მიერ სინთეზირებულია Mg, Ca, Sr და Cd ქლორიდული ჰმტა-თან კოორდინაციული ნაერთები. სინთეზისთვის ვიყენებდით შესაბამის მარილებს, რომლებსაც ვასუფთავებდით გადაკრისტალებით (წყალხსნარიდან) და ჰექსამეთილენტეტრამინს. სინთეზს ვატარებდით წყალხსნარებიდან. ამისთვის შესაბამის მარილთა წყალხსნარებს ვუმატებდით ჰმტა-ის წყალხსნარს მოლური თანაფარდობით $MCl_2 : L = 1 : 1$ ან $1 : 2$ (L - ჰმტა). ხსნარს ვაღულებდით 10-15 წუთი (ნალექის სრული გამოყოფის მიზნით).

ნალექები გამოიყოფოდა მყისიერად ან რამდენიმე დღის შემდეგ. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით, ვრეცხავდით წყლით, ეთილის სპირტით და ვაშრობდით ექსიკატორში $CaCl_2$ -ის თანაობისას.

ყველა სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთი თეთრი ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერებაა. იხსნებიან წყალში, ეთანოლში, დიმეთილსულფოქსიდში და დიმეთილფორმამიდში.

მიღებული კოორდინაციული ნაერთების შედგენილობა და ინდივიდუალობა დადგენილია მიკროელემენტური ანალიზით, ლობის ტემპერატურით და რენტგენოგრაფიული მეთოდით. როგორც აღნიშნულმა გამოკვლევებმა გვიჩვენა სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების რენტგენოგრამები ხასიათდებიან ინდივიდუალური ფარდობითი ინტენსივობებით (J) და სიბრტყეთაშორისი მანძილებით (d, Å), რაც ადასტურებს ამ ნაერთების ინდივიდუალობას. ელემენტური ანალიზის შედეგები მოცემულია ცხრ. 1-ში. უნდა აღინიშნოს, რომ კადმიუმის კოორდინაციული ნაერთების შემთხვევაში, როდესაც კომპონენტებს შორის თანაფარდობა $MCl_2 : L_2 = 1:1$ გამოიყოფა $CdCl_2 \cdot 2L \cdot 8H_2O$, ხოლო 1:2 თანაფარდობის შემთხვევაში - $CdCl_2 \cdot L_2 \cdot 10H_2O$ ყველა დანარჩენ ლითონებთან, როგორც 1:1 ისე 1:2 თანაფარდობისას გამოიყოფა $MCl_2 \cdot L_2 \cdot 10H_2O$ (M=Ca, Mg, Sr) შედგენილობის კოორდინაციული ნაერთები.

კომპლექსწარმოქმნელ ლითონებთან ჰმტა-ის მოლეკულების კოორდინირების გამოსაკვლევად შესწავლილია მიღებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრები. სპექტრების ჩაწერა ხდებოდა $400-4000 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, UR-20 და Specord M-80 სპექტროფოტომეტრებით ვაზელინში გასრესის მეთოდით. შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრების შესწავლის შედეგები მოცემულია ცხრ. 2-ში. შესადარებლად ცხრილში მოცემულია არაკოორდინირებული ლიგანდის (ჰმტა) შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრის გაშიფრვის შედეგებიც, კომპლექსნაერთების ინფრაწითელი სპექტრებში 400 სმ^{-1} ახლოს უბანში გამოვლენილია ჰმტა-თვის დამახასიათებელი

რხევის სისშირეები. ნაპოვნი რხევის სისშირეების მიკუთვნება მოვახდინეთ ჰმტა-ის ინფრაწითელი სპექტრების გამოთვლის მიხედვით [4], რომლის მიხედვითაც შეიძლება ვიმსჯელოთ შთანთქმის ზოლების ფარდობით ინტენსივობებზე.

ინფრაწითელი სპექტრების დეტალურმა გამოკვლევებმა გვიჩვენა, რომ ჰმტა-ის მოლეკულები ლითონების ატომებთან უშუალოდ არ წარმოქმნიან კოორდინაციულ ბმებს. ცხრ. 3-დან ჩანს, რომ საწყისი კრისტალური ჰმტა-ისა და კოორდინაციული ნაერთების C_6N_4 – ჩონჩხის და მეთილის ჯგუფების ყველა ვალენტური და დეფორმაციული რხევის სისშირეები ინფრაწითელ სპექტრებში პრაქტიკულად ემთხვევა ერთმანეთს. ცნობილია [5], რომ ჰმტა-ის მოლეკულის მიერ ბმის წარმოქმნა ამცირებს F_2 სიმეტრიას. ასევე ცნობილია [5], რომ ჰმტა მოლეკულების მხოლოდ H – ბმების წარმოქმნაში მონაწილეობა არ იწვევს სიმეტრიის მკვეთრ ცვლილებას. ამიტომ ჰმტა-ის სპექტრი კოორდინაციულ ნაერთებში ხასიათდება იგივე სისშირეებით, რომელიც დამახასიათებელია თავისუფალი ჰმტა-ის მოლეკულებისათვის.

ცხრილი 1. ლითონთა ჰმტა–სთან კოორდინაციული ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები და ლლობის ტემპერატურები

ნაერთი	Mr	განსაზღვრული %					გამოთვლილი %					ლლობ. T°C
		M	ალ	N	C	H	M	ჰალ	N	C	H	
MgCl ₂ ·L ₂ ·10H ₂ O	555,72	4,20	12,90	20,22	25,82	7,86	4,37	12,76	20,16	25,94	7,98	191-193
CaCl ₂ ·L ₂ ·10H ₂ O	571,50	7,01	12,28	19,69	25,19	7,61	7,01	12,41	19,61	25,22	7,76	216-218
SrCl ₂ ·L ₂ ·10H ₂ O	619,04	13,98	11,32	18,25	21,39	7,32	14,15	11,45	18,10	21,18	7,16	
CdCl ₂ ·L ₂ ·8H ₂ O	607,80	18,60	11,66	18,52	23,86	6,70	18,50	11,66	18,44	21,28	6,63	206-208
CdCl ₂ ·L ₂ ·10H ₂ O	643,83	17,36	11,20	14,28	22,49	6,76	17,47	11,01	17,40	22,39	6,89	210-212

ცხრილი 2. ჰმტა–(L)–ის და ჰმტა–თან ლითონთა კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის ინფრაწითელ სპექტრებში ნაპოვნი ტალღური სისშირეების (სმ⁻¹) მაქსიმუმები

1. L 424, 448, 504, 605, 680,700, 812, 825, 836, 936, 1010, 1132, 1190, 1232, 1278, 1366, 1448, 1465, 1488, 1526, 1546, 1578, 1591, 1628, 1642, 1654, 1674, 1686, 1718, 1747, 1225, 1830, 1872, 1947, 2018, 2018, 2112, 2147, 2190, 2480, 2656, 2696, 2748, 3856, 2S88, 2976, 3328, 3464.
2. MgCl₂·L₂·10H₂O 430, 440, 464, 494, 512, 530, 550, 556, 578, 602, 660, 738, 775, 812, 854, 884, 896, 920, 938, 1015, 1148, 1190, 1202, 1214, 1244, 1256, 1274, 1286, 1302, 1316, 1340, 1364, 1376, 1388, 1406, 1424, 1448, 1456, 1496, 1505, 1528, 1544, 1568, 1574, 1574, 1592, 1610, 1634, 1700, 1742, 1838, 1880, 1898, 1910, 1946, 3120, 3308, 3404, 3448, 3506, 3600(ფ)
3. CaCl₂·L₂·10H₂O 420, 440, 462, 518, 595(?), 665(?), 698, 736, 815, 824, 860, 1020, 1160, 1208, 1248, 1315, 1382, 1415, 1475, 1520, 1538, 1558, 1578, 1688, 3030, 3130, 3140, 3250, 3380, 3420, 3440, 3520, 3540
4. SrCl₂·L₂·10H₂O 428, 450, 484, 500, 520, 532, 548, 560, 580, 608, 620, 660, 772, 760, 856, 924, 934, 970, 996, 1012, 1028, 1092, 1136, 1156, 1224, 1260, 1280, 1320, 1336, 1348, 1360, 1372, 1384, 1382,1408, 1416, 1426, 1436, 1450, 1456, 1464, 1488, 1496, 1504, 1518, 1540, 1556, 1568, 1576, 1596, 1644, 1648, 1652, 1670, 1682, 1696, 1714, 1730, 1826, 1844, 3112, 3132, 3250, 3400, 3460, 3600(ფ)
5. CdCl₂·L₂·8H₂O 413, 432, 451, 508, 560, 573, 586, 603, 662, 760, 836, 1115, 1244, 1300, 1340, 1437, 1456, 1470, 1490, 1507, 1520, 1539, 1558, 1578, 1601, 1635, 1685, 1718, 1731, 1770, 1793, 1808, 1827, 1840, 1865, 3080, 3200, 3356, 3454, 3600(ფ)
6. CdCl₂·L₂·10H₂O 403, 422, 458, 506, 520, 536, 554, 578, 606, 650(?), 748, 832, 882, 936, 1020, 1242, 1242, 1272, 1340, 1368, 1434, 1448, 1480, 1490, 1500, 1516, 1527, 1546, 1564, 1585, 1587, 1610, 1628, 1685, 1688, 1706(ფ), 1742, 1754, 1784, 1796, 1838, 1844, 1868, 1886, 3016, 3312, 3480, 3600(ფ).

კოორდინაციული ნაერთის ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი წყლის მოლეკულების რხევის უბანში გვიჩვენებს, რომ ორი ტიპის კრისტალოგრაფულად არაეკვივალენტური წყლის მოლეკულების დეფორმაციული რხევის δ(H₂O) უბანში შეინიშნება შთანთქმის ორი ზოლი. პირველი ზოლის

მაქსიმუმი მდებარეობს 1578-1664 სმ⁻¹, ხოლო მეორე ზოლის მაქსიმუმი კი 1688-1700 სმ⁻¹ უბანში (ცხრ. 4).

სპექტრში OH – ვალენტური რხევის უბანში შეინიშნება სამ-სამი ზოლი 3030-3200, 3340-3400 და 3400-3600 სმ⁻¹. პირველი მათგანი მიეკუთვნება წყლის მოლეკულებს, რომლებიც დაკავშირებულია H – ბმებით -HOH - N (ჰმტა).

3400-3600 სმ⁻¹ მაქსიმუმი შეიძლება მიეკუთვნებოდეს გარესფერული წყლის მოლეკულების OH-ბმებს, რომლებიც მონაწილეობენ Cl⁻-ის ატომებთან H-ბმებში.

ამ ორი სახეობის წყლის მოლეკულას კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელ სპექტრებში შეესაბამება შთანთქმის ორი ზოლი ~735-770 და 640-666 სმ⁻¹ უბანში (ცხრ. 3), რომელიც პასუხობს არაბრტყელ დეფორმაციულ რხევებს ν_L(H₂O).

მაგნიუმის, კალციუმის, სტრონციუმის და კადმიუმის ქლორიდული ნაერთების ინფრაწითელ სპექტრებში ჩნდება ზოლები რამდენჯერმე გახლეჩილი ზოლების სახით. ამის შედეგად შეიძლება გავაკეთოთ დასკვნა, რომ ზოლების გახლეჩა ხდება არა კოორდინირებული Cl⁻ იონების ლითონის ატომებთან კოორდინირებით, არამედ წყლის მოლეკულების გარესფერული Cl⁻ იონებთან ძლიერი წყალბადური ბმების წარმოქმნით.

ამგვარად, კოორდინაციული ნაერთების შედგენილობა შეიძლება შემდეგი სახით გამოისახოს: [M(H₂O)₆]Cl₂ · L₂ · nH₂O, სადაც M = Mg, Ca, Sr და Cd; n = 2, 4.

ცხრილი 3. ჰმტა–სთან ლითონთა ნიტრატული კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელ სპექტრებში ჰმტა–ის მოლეკულის რხევითი სისშირეები

№	ნაერთი	F ₂						
		ν ჯგუფი		δ ჯგუფი		ρ(H ₂ O)	ν _L (CH ₂)	ν _L (CH ₂)
		ν ₂	ν ₁₀	ν ₇	N ₈			
1	L (კრისტ.)	1004	1238	511	672	812	1385	1472
2	L კრისტ. (ჩვენი მონაცემები)	1010	1232	504	680	812	1366	1448 1465 1488
3	MgCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	1018	1214	512	660	815	1388	1472
4	CaCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	1020	1248	517	665	815	1382	1475
5	SrCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	1012	1224	500	660	815	1384	1472
6	CdCl ₂ · L ₂ · 8H ₂ O	1115	1244	508	662	836	1340	1490
7	CdCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	1020	1242	506	662	832	1368	1480(?)

ცხრილი 4. ლითონთა ჰმტა–თან ნიტრატული კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელ სპექტრებში წყლის მოლეკულების რხევითი სისშირეები (ფ–ფართო)

№	ნაერთი	HOH ...	HOH ...	δ(H ₂ O)	ν _L (H ₂ O)
		... N(ჰმტა)	... NO ₃		
		ν (OH)			
1	MgCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	3120	3506 3600 (ფ)	1634 1700	738 660
2	CaCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	3030 3120	3520 3540	1578 1688	665(?)
3	SrCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	3112 3132	3460 3600 (ფ)	1644 1696	732 660
4	CdCl ₂ · L ₂ · 10H ₂ O	3016	3480 3600 (ფ)	1628 1685	748 650(?)
5	CdCl ₂ · L ₂ · 8H ₂ O	3080	3454 3600 (ფ)	1688 1635 1685	760 662

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Лекарственные средства. Том 2. Машковский М.Д.М.; 1985, 576 с.
2. Органическая кристаллохимия. Китайгородский А.И. М.; Изд-во АН СССР. 1955, 186с.
3. Гюнер Э.А., Мельниченко А.М. О молекулярной соединении хлорида бериллия с уротропином. Журнал неорг. химия. Том 2. №3. С. 429-431.
4. Топурия Е.С. Синтез и исследование координационных соединений металлов с некоторыми биоактивными лигандами. Диссертация на соискание учёной степени кандидата химических наук. ГТУ. Тбилиси, 2003.
5. Кононова М.А., Пологих П.В., Баличева Т.Г. ИК спектры и строение нитритных комплексов Pd(II) с гесаметилентетраминном. Коорд. химия. 1977, т.3, с. 106-109.

COORDINATIONAL COMPOUNDS OF METALS WITH HEXAMETHYLENTETRAMINE (HMTA)

Maia Tsintsadze, Aivengo Mamulasvili, Revaz Kldiashvili, Eka Topuria, Tatia Tusiashvili, Tamar Tsintsadze

Georgian Technical University

SUMMARY

The article describes the synthesis of coordinational compounds of Mg, Ca, Sr, and Cd with hexamethylenetetramine, their physic- chemical properties and the infrared spectra of absorption. The composition of the synthesized substances is identified by elemental analysis, and their identity is defined by measuring temperatures of fusion, as well as through rentgenographical analysis.

КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ МЕТАЛЛОВ С ГЕСАМЕТИЛЕНТЕТРАМИНОМ (ГМТА)

М.Г.Цинцадзе, А.М.Мамулашвили, Р.Ш.Клдиашвили, Э.С.Топурия, Т.Н.Тусиашвили, Т.Г.Цинцадзе

Грузинский Технический Университет

РЕЗЮМЕ

Синтезированы координационные соединения Mg, Ca, Sr, и Cd с гесаметилентетраминном. Исследованы их физико-химические свойства, а также спектры инфракрасного поглощения. Состав синтезированных соединений установлен элементарным анализом, а их индивидуальность температурами плавления и рентгенографическим методом.

კოორდინაციულ ნაერთთა ქიმია

კობალტისა (II) და ნიკელის (II) ერთმანეთისაგან დაცილება წყალხსნარებში

იზოლდა დიდბარიძე, მაია რუსია, მანუჩარ კიკალიშვილი, კახა რუხაია, რომან გიგაური

*აკაკი წერეთლის ქუთაისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი*

დამუშავებულია კობალტის (II) და ნიკელის (II) იონების ერთმანეთისაგან დაცილების სრულიად ახალი ხერხი. ექსპერიმენტმა დაადასტურა, რომ ყველა შემთხვევაში, მიუხედავად კობალტის (II) და ნიკელის (II) წონითი თანაფარდობისა, ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატით წყალხსნარებიდან ილექება მხოლოდ ერთი შედგენილობის ნიკელის (II) ორთოფენილენდიამინატი. მასში კობალტის (II) შემცველობა კი არსებითად დამოკიდებულია მხოლოდ ხსნარის განზავებაზე.

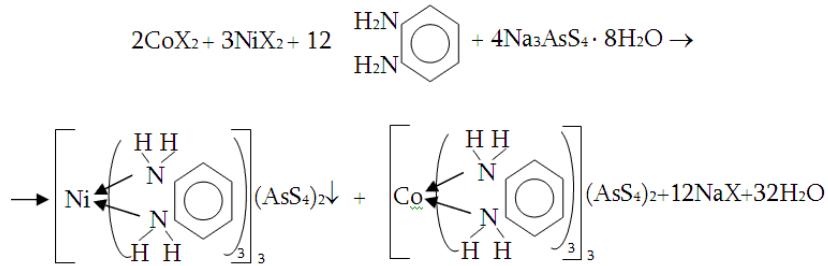
კობალტი და ნიკელი ტიპიურ ელემენტ-ანალოგებს წარმოადგენენ, რაც განპირობებულია ატომთა აღნაგობის დიდი მსგავსებით. ბუნებაში ისინი ერთმანეთს „დასდევენ“ ქმნიან რა პოლიელემენტურ საბადოებს. კობალტისა და ნიკელის ერთმანეთისაგან დაცილება დაკავშირებულია არა ერთ ტექნიკურ სიმძლეესთან. ეს პრობლემა ამჟამად იჩენს ხოლმე თავს, როდესაც სურთ ისეთი ბუნებრივი ნარევის ანალიზი, რომელიც ერთდროულად ორივე ამ ელემენტს შეიცავს [1, 2]. მივაქციეთ რა ყურადღება ამ გარემოებას, მიზნად დავისახეთ დავკვებუშავებინა კობალტისა (II) და ნიკელის (II) იონების ერთმანეთისაგან დაცილება-განცალკავების ახალი მეთოდიკა, რომელსაც ანალოგი ვერ მოვუძებნეთ ჩვენთვის ხელმისაწვდომ ლიტერატურულ წყაროებში.

ექსპერიმენტული ნაწილი

ჩვენს წინა შრომებში [3, 4, 5] აღნიშნული იყო, რომ ზოგიერთი d-მეტალის ტეტრათიოარსენატის ო-ფენილენდიამინატი შეიძლება მიღებულ იქნას უბრალო მიმოცვლის რეაქციით – მეტალის ხსნადი მარილისა და ორთო-ფენილენდიამინის ურთიერთქმედების პროდუქტზე, ინდივიდუალურ მდგომარეობაში გამოყოფის გარეშე, ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატის მოქმედებით, ზოგისა კი – არა. მაგალითად, ერთი და იგივე პირობებში ამ ხერხით რაოდენობრივად ილექება ნიკელის (II) ო-ფენილენდიამინატი, მაშინ როდესაც, კობალტის (II) ტეტრათიოარსენატის კომპლექსი ორთო-ფენილენდიამინთან ასევე რაოდენობრივად უცვლელი რჩება იგივე ხსნარში.

გამორკვა, რომ თუ ხსნარი შეიცავს Co^{2+} და Ni^{2+} იონებს, დამოუკიდებლად იმისა, თუ ანიონების სახით რა არის აღებული, ნიკელი შეიძლება რაოდენობრივად დაილექოს, თუ ხსნარს დავამუშავებთ ექვივალენტური რაოდენობა ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატის ხსნარით მას შემდეგ, რაც იგი დამუშავებულ იქნება ასევე ექვივალენტური რაოდენობა ორთო-ფენილენდიამინით. მაშასადამე, ამ ხერხის არსი იმაში მდგომარეობს, რომ ნეიტრალურ ან სუსტ მჟავა გარემოში, ანუ ისეთში, რომელსაც წარმოქმნის კობალტისა (II) და ნიკელის (II) ხსნადი მარილები განზავებულ ხსნარებში, ადვილად იერთებენ ორთო-ფენილენდიამინს, ოღონდ მიერთების პროდუქტი რჩება ხსნარში ნაერთების კარგად ხსნადობის გამო. ასეთნაირად მიღებული ხსნარი, რომელიც მეტალთა ორთო-ფენილენდიამინატებს შეიცავს, დამლექავით – ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატის წყალხსნარით დამუშავებისას, ნალექის სახით იძლევა მხოლოდ და მხოლოდ ნიკელის (II) ტეტრათიოარსენატის კოორდინაციულ ნაერთს, ხოლო კობალტის (II) ორთოფენილენდიამინატი ასევე ხელუხლებლად რჩება დედახსნარში.

ამრიგად, კობალტისა (II) და ნიკელის (II) მარილების დამუშავებისას ჯერ ო-ფენილენდიამინითა და შემდეგ ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატით, მიმდინარეობს რეაქცია:



როგორც ვხედავთ, ნალექის სახით წარმოიქმნება მხოლოდ ნიკელის (II) ტეტრათიოარსენატის კომპლექსი ო-ფენილენდიამინთან, რითაც იქმნება საუკეთესო საშუალება ამ ორი ელემენტ-ანალოგის ერთმანეთისაგან დაცილებისა.

ექსპერიმენტი წარიმართა შემდეგნაირად: 250 მლ-იან ერლენმეიერის კოლბაში, რომელსაც მორგებული ჰქონდა უკუმაცივარი, 100 მლ წყალში გავხსენით 2,38 გ $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (0,01 მოლი) და ზუსტად ისეთივე რაოდენობის $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ კოლბის შიგთავსს დავამატეთ 7,13 გ (0,0066 მოლი) ორთო-ფენილენდიამინის ნაჯერი ხსნარი ეთილის სპირტში. ხსნარმა ფერი შეიცვალა, თითქოს ემულსია წარმოიქმნა. ლიგანდის რეაქციაში სრულად შესვლის მიზნით, სარეაქციო მასა ვადულებთ 5-7 წთ-ის განმავლობაში, შემდეგ გავაცივებთ და კობალტის შიგთავსი დავამუშავებთ 5,41 გ (0,03 მოლი) ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატის ნაჯერი წყალხსნარით. მაშინვე დაილექა ყავისფერი წვრილდისპერსიული ნივთიერება, რომელიც კრისტალური ფორმის სრულყოფის მიზნით, დავაყოვნებთ დედახსნარში 2-3 საათის განმავლობაში. ნალექი გავფილტრებთ, კარგად ჩაერეცხებთ წყლით, შემდეგ სპირტით და გამოვამზებთ ჰაერზე მუდმივი მასის მიღებამდე. ანალიზმა დაგვარწმუნა, რომ მივიღეთ 5,06 გ (0,03 მოლი) ნიკელის (II) ტეტრათიოარსენატის კომპლექსი ორთო-ფენილენდიამინთან, რაც შეადგენს თეორიულის 97,6 %-ს კომპლექსისათვის: $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_4(\text{NH}_2)_2)_3(\text{AsS}_4)_2]$

ნაპოვნია, %: Ni 11,25; As 9,73; N 16,13

გამოთვლილია, %: Ni 11,33; As 9,65; N 16,22

ნიმუშში კობალტის შემცველობა განსაზღვრულ იქნა ატომურ-აღსორბციული მეთოდით მეცნიერებათა აკადემიის გეოლოგიის ინსტიტუტში.

ასეთივე მიდგომით ჩატარებული იქნა სხვა ცდებიც. გამოსავალ ნივთიერებათა ჩატვირთვა და კვლევის შედეგები მოტანილია №1 ცხრილში.

ცხრილი 1. გამოსავალ ნივთიერებათა ჩატვირთვა და მიზნობრივი პროდუქტების გამოსავლიანობა

ც დ ი ს №	გამოსავალ ნივთიერებად აღებულია								დაკეპვის შედეგად მიღებულია: $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_4(\text{NH}_2)_2)_3(\text{AsS}_4)_2]$			
	მარილები			$\text{C}_6\text{H}_4(\text{NH}_2)_2$		H_2O	$\text{Na}_3\text{AsS}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$		გ	მოლი	%	Co, %
	ფორმულა	გ	მოლი	გ	მოლი	მლ	გ	მოლი				
I	$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,38	0,010	7,13	0,066	100	5,41	0,013	5,06	0,003	97,6	$8 \cdot 10^{-2}$
	$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,38	0,010									
II	$\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,91	0,010	7,13	0,066	100	5,41	0,013	5,08	0,003	98,0	$9 \cdot 10^{-2}$
	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,91	0,010									
III	$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,38	0,010	5,35	0,049	100	4,16	0,010	5,09	0,003	98,3	$7 \cdot 10^{-2}$
	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	1,46	0,005									
IV	$\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	1,46	0,005	5,35	0,049	75	4,16	0,010	2,55	0,0016	98,5	$8 \cdot 10^{-2}$
	$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	2,38	0,010									
V	$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	1,17	0,005	5,00	0,046	100	3,88	0,009	2,51	0,0016	97,0	$1 \cdot 10^{-3}$
	$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	1,08	0,009									

ექსპერიმენტმა გვიჩვენა, რომ კობალტის (II) და ნიკელის (II) იონების დაცილების ხარისხი თითქმის არ არის დამოკიდებული იმაზე, თუ რა მარილების სახით არიან გახსნილი. ჩვენ გამოვიკვლიეთ ორივე მეტალის ქლორიდების ერთმანეთისაგან დაცილების შესაძლებლობა, ნიტრატებისა და შერეული – ერთი ქლორიდის სახით და მეორე – ნიტრატის სახით და მივედით დასკვნამდე, რომ ყველა შესწავლილ შემთხვევაში მათი ურთიერთდაცილება არ წარმოადგენს რაიმე პრეპარატორულ სიძნელეს, თუ:

1. ხსნარი წინასწარ დამუშავდება ლიგანდის საკმაო რაოდენობით, იმ მიზნით, რომ ორივე მეტალმა სრულიად შეივსოს საკოორდინაციო რიცხვი, უმჯობესია ო-ფენილდიამინი სარეაქციოდ აღებული იქნას 5-10 %-ით მეტი თეორიულთან შედარებით;

2. საუკეთესო დალექვა მიიღწევა იმ შემთხვევაში, თუ რეაქციის შედეგად წარმოიქმნება 3:2 ტიპის სრული მარილი და არა, მაგალითად, $[M(L)_3]NaAsS_4$ როგორც ირკვევა, ასეთი შერეული კომპლექსის ხსნადობა $[M(L)_3]_3(AsS_4)_2$ ტიპის კოორდინაციულ ნაერთებთან შედარებით მაღალია, ამიტომ ნიკელი ილექება ნაწილობრივად. მაშასადამე, თუ გვინდა ამ ორი ელემენტის ერთმანეთისაგან რაოდენობრივი განცალკევება, მათ შემცველ ხსნარს დამლექავი უნდა დაემატოს ზუსტად განსაზღვრული რაოდენობით, ან მცირედ მეტიც კი – თეორიულთან შედარებით.

ეს ორი პირობა თუ დაცულია და გამოვრიცხავთ თანდალექვის ხელშემწყობ პირობებს, მაშინ კობალტისა (II) და ნიკელის (II) იონების ერთმანეთისაგან განცალკევება წყალხსნარებში სავსებით გაანტირებულია.

მაგრამ აქვე ისიც უნდა აღინიშნოს, რომ შეიძლება ეს პირობები დაცული იყოს, მაგრამ დალექილი ნიკელის (II) კომპლექსი მცირეს, მაგრამ რაღაც რაოდენობის კობალტს მაინც შეიცავდეს. ჩვენი გამოკვლევებით, მივედით იმ დასკვნამდე, რომ კობალტის გაჩენა ნალექში განპირობებული უნდა იყოს თანდალექვის მოვლენით. როგორც ჩანს, ილექება რა ნიკელის (II) ტეტრათიოარსენატის კოორდინაციული ნაერთი ორთო-ფენილენდიამინთან, ეს უკანასკნელი იზომორფულობის გამო თან წარიტაცებს კობალტის (II) ანალოგიურ კომპლექსს. აი, სწორედ ეს ფაქტი განაპირობებს მცირედ შერეული ნალექის წარმოქმნას.

ისიც ირკვევა, რომ თანდალექვის ხარისხი დიდად არის დამოკიდებული ხსნარში იონთა კონცენტრაციაზე. სახელდობრ, რაც მაღალია კობალტისა (II) და ნიკელის (II) მარილების კონცენტრაცია, მით გაძნელებულია ქიმიურად სუფთა ნივთიერების დალექვა. აქედან გამომდინარე, თუ გვინდა სრული განცალკევება კობალტის (II) და ნიკელის (II) იონებისა, დასამუშავებლად ხსნარები უნდა იყოს განზავებული.

როგორც ირკვევა [6], კობალტისა და ნიკელის ურთიერთგანცალკევებას ხელს უშლიან ხსნარში Cu^{2+} , Hg^{2+} , Cd^{2+} და Mn^{2+} - იონების არსებობა, მაგრამ ხელს არ შეუშლის რკინის $2+$ – იონების არსებობა, რადგან არც მისი ურთიერთქმედების პროდუქტი ო-ფენილენდიამინთან არ ილექება ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატით მიმოცვლის რეაქციის შედეგად. ასეთივე დასკვნამდე ჩვენ მივედით სპეციალურად სხვადასხვა იონების შემცველი ხსნარების გამოკვლევის შედეგადაც.

ამგვარად ჩვენს მიერ დამუშავებულია კობალტისა (II) და ნიკელის (II) იონების ერთმანეთისაგან დაცილების სრულიად ახალი, ორიგინალური ხერხი. ცდებმა ცალსახად ნათელყო, რომ ყველა შემთხვევაში, მიუხედავად კობალტისა (II) და ნიკელის (II) იონთა წონითი თანაფარდობისა, ნატრიუმის ტეტრათიოარსენატით წყალხსნარებიდან ილექება მხოლოდ ერთი შედგენილობის ნიკელის (II) ორთოფენილენდიამინატი. მასში კობალტის (II) შემცველობა კი არსებითად დამოკიდებულია მხოლოდ ხსნარის განზავებაზე.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Шарло Г. Методы аналитической химии. Количественный анализ неорганических соединений. М.: Химия, 1966.
2. Гиллебранд В.Ф., Лендель Г.Э., Брайт Г.А., Гофман Д.И. Практическое руководство по неорганическому анализу. М.: Химия, 1966.
3. I. Didbaridze, G.Khelashvili, A. Chubinidze, R. Gigauri. Synthesis and Study of Thethrathioarsenates of d¹⁰-Metals. Bulletin Of Georgian Academy Of Sciences. Vol 157. №1, 1998. Tbiisi.
4. მ. სამხარაძე, ი. დიდბარიძე, რკინის (II), კობალტის (II) და ნიკელის (II) ტეტრათიოარსენატების (V) კოორდინაციული ნაერთები ორთო-ფენილენდიამინთან. საქართველოს ქიმიური ჟურნალი, ტ.7, №2, 2007.
5. ი. დიდბარიძე, მ. სამხარაძე, ნ. კახიძე, რ. გიგაური. თუთიის, კადმიუმისა და ვერცხლისწყლის ტეტრათიოარსენატების კოორდინაციული ნაერთები ორთო-ფენილენდიამინთან. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე. ქიმიის სერია, ტ. 34, №1, 2008.
6. დიდბარიძე ი.ს. ტეტრათიოლარიშხანმჟავას დ-მეტალთა მარილები და მათი კოორდინაციული ნაერთები მონო- და ბიდენტატურ აზოტშემცველ ლიგანდებთან. დისერ. ქიმიის მეცნ. კანდიდატის ხარისხის მოსაპოვებლად. თბილისი, 1999 168 გვ.
7. Американская картотека ASTM (American Society for Testing and Materials). 1997.

SEPARATION OF NICKEL (II) FROM COBALT (II) IN AQUEOUS SOLUTIONS

Izolda Didbaridze, Maia Rusia, Manuchar Kikalishvili, Kakha Rukhaia, Roman Gigauri
Kutaisi A. Tsereteli State University, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Completely new method of separation of Co (II) ions from Ni (II) ions in aqueous solution has been developed. Experimentally confirmed that regardless of the Co(II)/Ni(II) weight ratio, in all cases of using of sodium tetrathioarsenate as a precipitant in aqueous solutions, nickel (II) o-phenylenediaminate of identical composition is precipitated. Content of cobalt (II) in the precipitate to a large extent depends only on the degree of dilution.

ОТДЕЛЕНИЕ КОБАЛЬТА (II) ОТ НИКЕЛЯ (II) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Изольда Дидбаридзе, Мая Русия, Манучар Кикалишвили, Каха Рухая, Роман Гигаури
*Кутаисский Государственный Университет им. Ак. Церетели
Тбилисский Государственный Университет им. Иване Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Разработан совершенно новый способ отделения ионов кобальта (II) и никеля (II) друг от друга. Экспериментально подтверждено, что во всех случаях, вне зависимости от весового соотношения кобальта (II) и никеля (II), при использовании водного раствора тетратиоарсената натрия в осадок выпадает ортофенилендиаминат никеля (II) идентичного состава. Содержание кобальта (II) в значительной степени зависит только от степени разбавления раствора.

ХИМИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ 2,8-ДИЭТИЛ-2,4,6,8-ТЕТРААЗАБИЦИКЛО[3,3,0]-ОКТАНДИОНА-3,7

М.Г.Цинцадзе^{*,**}, Д.М.Лочошвили^{*}, Г.В.Цинцадзе^{**}, Н.Г.Гегешидзе^{**}, И.О.Гвелесиани^{**},
Л.Л.Голодзе^{**}

**Тбилисский государственный университет им. И.Джавახишвили*

Р.И.Агладзе Институт неорганической химии и электрохимии

***Грузинский технический университет*

Квантово-химическим методом AM1 вычислены энергетические, геометрические и структурные характеристики 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7.

Целью данной работы было изучение комплексообразующей способности 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7 с металлами. Полуэмпирическим квантово-химическим методом AM1 [1] были вычислены энергетические, электронные и структурные характеристики данной молекулы как в газовом состоянии, так и в разных растворителях. В свою очередь последние характеризуются различными значениями диэлектрических проницаемостей (табл. 1).

Результаты квантово-химических расчетов приводятся в табл. 1-3.

Как видно из табл. 1, теплоты образования 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7 во всех случаях имеют отрицательные значения, а самое высокое значение – в газовой фазе. Это, в свою очередь, означает, что растворители значительно увеличивают устойчивость изучаемой молекулы. Влияние растворителей на увеличение дипольных моментов молекулы 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7 различное и своего максимального значения дипольный момент достигает в воде. Это можно объяснить образованием дипольного индукционного момента.

При изучении заселенности атомных орбиталей на атомах азота и кислорода, как видно из табл. 1, заселенность s-орбиталей на атомах кислорода O(9) и O(10) практически не меняется, на атоме N(2) заселенность p-орбиталей меняется в ряду $p_x < p_y > p_z$, на атоме N(4) $p_x < p_y < p_z$, на атоме N(6) $p_x > p_y < p_z$, а на атоме N(8) $-p_x > p_y < p_z$. Это указывает на различную картину заселенности электронами p-орбиталей. Здесь же, надо отметить стерические препятствия, конкретно, наличие заместителей C_2H_5 -групп при атомах N(2) и N(8) (рис. 1).

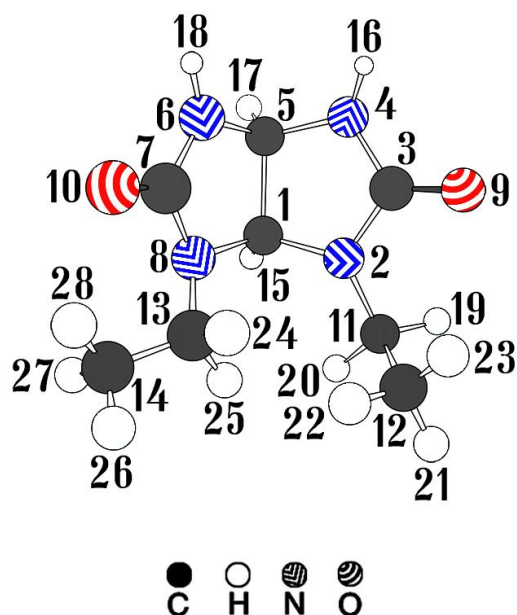


Рис. 1. Молекула 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7

Таблица 1. Значения диэлектрической проницаемости растворителей (ϵ), теплоты образования (ΔH), дипольных моментов (μ), зарядов на атомах (q), электронной плотности и распределение электронов на атомных орбиталях (s, p) молекулы 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7

N	Растворитель, ϵ	$\frac{\Delta H, \text{кДж}}{\text{моль}}$	$\mu, \text{Д}$	Атом	q	Эл. плотность	Распределение электронов на орбиталях			
							2S	2P _x	2P _y	2P _z
1	Газ	-144.03	2.78	N(2)	-0.354	5.354	1.511	1.063	1.072	1.707
				N(4)	-0.380	5.480	1.523	1.043	1.097	1.717
				N(6)	-0.424	5.424	1.476	1.632	1.095	1.221
				N(8)	-0.290	5.290	1.560	1.480	1.088	1.160
				O(9)	-0.346	6.346	1.917	1.114	1.805	1.508
				O(10)	-0.353	6.353	1.917	1.448	1.837	1.448
2	H ₂ O, 78.5 Вода	-246.41	5.21	N(2)	-0.311	5.311	1.554	1.086	1.072	1.598
				N(4)	-0.380	5.380	1.525	1.042	1.117	1.694
				N(6)	-0.385	5.385	1.509	1.607	1.095	1.173
				N(8)	-0.298	5.298	1.549	1.503	1.091	1.153
				O(9)	-0.500	6.500	1.915	1.169	1.819	1.595
				O(10)	-0.513	6.513	1.915	1.556	1.869	1.171
3	C ₂ H ₆ SO, 49.0 Диметилсульфоксид	-245.16	5.17	N(2)	-0.313	5.313	1.553	1.085	1.073	1.600
				N(4)	-0.381	5.381	1.526	1.046	1.117	1.694
				N(6)	-0.384	5.384	1.509	1.596	1.099	1.179
				N(8)	-0.302	5.302	1.545	1.501	1.097	1.157
				O(9)	-0.495	6.495	1.915	1.168	1.818	1.523
				O(10)	-0.512	6.512	1.915	1.552	1.869	1.173
4	CH ₃ OH, 32.6 Метанол	-242.54	5.21	N(2)	-0.307	5.307	1.559	1.086	1.074	1.587
				N(4)	-0.381	5.381	1.523	1.043	1.117	1.697
				N(6)	-0.387	5.387	1.507	1.612	1.094	1.172
				N(8)	-0.297	5.297	1.550	1.506	1.089	1.151
				O(9)	-0.493	6.491	1.915	1.168	1.817	1.591
				O(10)	-0.508	6.508	1.916	1.556	1.868	1.167
5	C ₂ H ₅ OH, 24.3 Этанол	-239.66	5.05	N(2)	-0.309	5.309	1.558	1.086	1.073	1.590
				N(4)	-0.380	5.381	1.526	1.042	1.116	1.694
				N(6)	-0.387	5.387	1.510	1.618	1.091	1.167
				N(8)	-0.296	5.296	1.553	1.504	1.088	1.150
				O(9)	-0.486	6.486	1.915	1.169	1.814	1.586
				O(10)	-0.501	6.501	1.916	1.551	1.867	1.166
6	(CH ₃) ₂ CO, 20.7 Ацетон	-239.48	5.04	N(2)	-0.312	5.312	1.554	1.085	1.074	1.597
				N(4)	-0.382	5.382	1.525	1.043	1.117	1.695
				N(6)	-0.386	5.386	1.508	1.602	1.097	1.179
				N(8)	-0.302	5.302	1.545	1.503	1.095	1.157
7	CHCl ₃ , 4.7 Хлороформ	-215.25	3.93	N(2)	-0.350	5.350	1.501	1.068	1.082	1.717
				N(4)	-0.380	5.380	1.530	1.040	1.110	1.698
				N(6)	-0.392	5.392	1.509	1.619	1.088	1.174
				N(8)	-0.314	5.314	1.538	1.523	1.082	1.170
				O(9)	-0.462	6.462	1.916	1.137	1.826	1.582
				O(10)	-0.457	6.457	1.916	1.523	1.860	1.157
8	C ₆ H ₁₂ , 1.9 Гексан	-178.04	3.24	N(2)	-0.351	5.351	1.511	1.067	1.069	1.703
				N(4)	-0.383	5.383	1.525	1.042	1.106	1.708
				N(6)	-0.404	5.404	1.496	1.639	1.086	1.185
				N(8)	-0.301	5.301	1.551	1.504	1.082	1.162
				O(9)	-0.399	6.399	1.917	1.126	1.814	1.541
				O(10)	-0.399	6.399	1.916	1.489	1.847	1.145

Таблица 2. Значения диэлектрических проницаемостей растворителей (ϵ), длин связей (R_{ij}) и порядков связей (P_{ij}) молекулы 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7

Растворитель, ϵ	$R_{1,2}$ Å	$P_{1,2}$	$R_{2,3}$ Å	$P_{2,3}$	$R_{3,4}$ Å	$P_{3,4}$	$R_{4,5}$ Å	$P_{4,5}$	$R_{5,6}$ Å	$P_{5,6}$	$R_{6,7}$ Å	$P_{6,7}$	$R_{7,8}$ Å	$P_{7,8}$	$R_{1,8}$ Å	$P_{1,8}$
1 Газ	1.462	0.929	1.420	0.996	1.418	1.012	1.456	0.947	1.447	0.946	1.407	1.023	1.434	0.984	1.469	0.941
2 H ₂ O, 78.5 Вода	1.478	0.931	1.423	1.028	1.406	1.080	1.458	0.944	1.457	0.943	1.402	1.089	1.423	1.034	1.472	0.935
3 C ₂ H ₆ SO, 49.0 Диметил- сульфоксид	1.477	0.932	1.424	1.026	1.406	1.079	1.458	0.943	1.457	0.945	1.402	1.086	1.421	1.036	1.471	0.935
4 CH ₃ OH, 32.6 Метанол	1.479	0.932	1.426	1.022	1.405	1.079	1.458	0.944	1.457	0.943	1.401	1.089	1.423	1.031	1.472	0.936
5 C ₂ H ₅ OH, 24.3 Этанол	1.479	0.932	1.425	1.022	1.407	1.073	1.457	0.945	1.458	0.943	1.403	1.084	1.424	1.028	1.472	0.937
6 (CH ₃) ₂ CO, 20.7 Ацетон	1.477	0.932	1.425	1.022	1.407	1.076	1.458	0.943	1.456	0.945	1.403	1.083	1.422	1.033	1.470	0.935
7 CHCl ₃ , 4.7 Хлороформ	1.464	0.922	1.408	1.046	1.413	1.046	1.459	0.946	1.456	0.946	1.408	1.057	1.422	1.023	1.467	0.936
8 C ₆ H ₁₂ , 1.9 Гексан	1.464	0.926	1.416	1.017	1.415	1.028	1.457	0.946	1.452	0.946	1.408	1.039	1.429	1.000	1.468	0.938

Растворитель, ϵ	$R_{1,5}$ Å	$P_{1,5}$	$R_{3,13}$ Å	$P_{3,13}$	$R_{2,11}$ Å	$P_{2,11}$	$R_{3,9}$ Å	$P_{3,9}$	$R_{7,10}$ Å	$P_{7,10}$	$R_{13,14}$ Å	$P_{13,14}$	$R_{11,12}$ Å	$P_{11,12}$
1 Газ	1.644	0.923	1.446	0.926	1.440	0.918	1.243	1.736	1.244	1.730	1.510	0.987	1.522	0.984
2 H ₂ O, 78.5 Вода	1.639	0.925	1.447	0.914	1.450	0.912	1.257	1.606	1.259	1.589	1.520	0.989	1.517	0.992
3 C ₂ H ₆ SO, 49.0 Диметил- сульфоксид	1.639	0.924	1.447	0.913	1.450	0.911	1.257	1.610	1.259	1.590	1.520	0.988	1.517	0.991
4 CH ₃ OH, 32.6 Метанол	1.639	0.925	1.447	0.914	1.451	0.913	1.257	1.614	1.259	1.593	1.520	0.989	1.517	0.992
5 C ₂ H ₅ OH, 24.3 Этанол	1.638	0.925	1.448	0.915	1.450	0.914	1.256	1.620	1.258	1.601	1.519	0.989	1.517	0.992
6 (CH ₃) ₂ CO, 20.7 Ацетон	1.640	0.924	1.447	0.913	1.450	0.913	1.256	1.619	1.258	1.598	1.520	0.988	1.518	0.991
7 CHCl ₃ , 4.7 Хлороформ	1.646	0.923	1.445	0.915	1.440	0.908	1.254	1.632	1.253	1.641	1.521	0.987	1.519	0.984
8 C ₆ H ₁₂ , 1.9 Гексан	1.645	0.923	1.446	0.921	1.441	0.911	1.248	1.690	1.248	1.692	1.521	0.987	1.522	0.984

Таблица 3. Электронные заряды и электронные плотности на атомах молекулы 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетразабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7

Атом	Газ		H ₂ O, Вода		C ₂ H ₆ SO, Диметилсульфоксид		CH ₃ OH Метанол		C ₂ H ₅ OH Этанол		(CH ₃) ₂ CO Ацетон		CHCl ₃ Хлороформ		C ₆ H ₁₂ Гексан	
	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность	Заряд	Плотность
C1	0.102	3.897	0.635	3.936	0.669	3.933	0.611	3.938	0.061	3.939	0.067	3.932	0.101	3.898	0.098	3.901
N2	-0.354	5.354	-0.311	5.311	-0.313	5.313	-0.307	5.307	-0.309	5.309	-0.312	5.312	-0.350	5.350	-0.351	5.351
C3	0.378	3.621	0.412	3.583	0.410	3.589	0.409	3.592	0.408	3.591	0.408	3.591	0.413	3.586	0.394	3.605
N4	-0.380	5.380	-0.380	5.380	-0.381	5.381	-0.381	5.381	-0.380	5.381	-0.382	5.382	-0.380	5.380	-0.383	5.383
C5	0.120	3.873	0.097	3.902	0.096	3.903	0.099	3.900	0.097	3.902	0.097	3.902	0.099	3.900	0.108	3.891
N6	-0.424	5.424	-0.385	3.385	-0.384	5.384	-0.387	5.387	-0.387	5.387	-0.386	5.386	-0.392	5.392	-0.404	5.404
C7	0.379	0.620	0.411	3.588	0.412	3.587	0.410	3.589	0.408	3.591	0.410	3.589	0.403	3.596	0.388	3.611
N8	-0.290	5.290	-0.298	5.298	-0.302	5.307	-0.297	5.297	-0.206	5.296	-0.302	5.302	-0.314	5.314	-0.301	5.301
O9	-0.346	6.346	-0.500	6.500	-0.495	6.445	-0.493	6.493	-0.486	6.486	-0.487	6.487	-0.462	6.462	-0.399	6.399
O10	-0.353	6.353	-0.513	6.513	-0.512	6.512	-0.508	6.508	-0.501	6.501	-0.502	6.502	-0.457	6.457	-0.399	6.399
C11	-0.004	4.005	-0.040	4.040	-0.039	4.040	-0.042	4.042	-0.042	4.042	-0.040	4.040	-0.012	4.012	-0.010	4.010
C12	-0.228	4.228	-0.226	4.226	-0.226	4.226	-0.226	4.226	-0.226	4.226	-0.226	4.226	-0.238	4.238	-0.232	4.232
C13	-0.022	4.022	-0.030	4.033	-0.030	4.030	-0.032	4.032	-0.034	4.034	-0.029	4.029	-0.023	4.023	-0.024	4.024
C14	-0.224	4.224	-0.232	4.232	-0.232	4.232	-0.231	4.231	-0.230	4.231	-0.232	4.232	-0.231	4.231	-0.227	4.227
H15	0.131	0.868	0.183	0.816	0.182	0.817	0.181	0.818	0.179	0.820	0.179	0.820	0.166	0.833	0.148	0.851
H16	0.944	0.755	0.291	0.708	0.290	0.709	0.391	0.709	0.288	0.711	0.288	0.711	0.275	0.724	0.260	0.740
H17	0.135	0.864	0.192	0.807	0.191	0.808	0.190	0.810	0.189	0.811	0.188	0.811	0.174	0.825	0.154	0.845
H18	0.261	0.738	0.298	0.701	0.298	0.701	0.297	0.702	0.295	0.704	0.296	0.703	0.282	0.717	0.270	0.729
H19	0.093	0.907	0.094	0.905	0.094	0.905	0.093	0.906	0.093	0.906	0.093	0.907	0.103	0.896	0.099	0.900
H20	0.081	0.918	0.113	0.886	0.113	0.886	0.112	0.887	0.111	0.888	0.112	0.887	0.103	0.896	0.091	0.908
H21	0.081	0.918	0.098	0.906	0.098	0.901	0.098	0.901	0.098	0.901	0.097	0.902	0.094	0.906	0.087	0.912
H22	0.078	0.921	0.089	0.910	0.089	0.910	0.089	0.910	0.089	0.910	0.090	0.909	0.081	0.918	0.079	0.920
H23	0.102	0.897	0.090	0.909	0.090	0.909	0.090	0.909	0.091	0.908	0.091	0.908	0.094	0.905	0.099	0.900
H24	0.079	0.920	0.093	0.906	0.094	0.905	0.093	0.906	0.093	0.906	0.093	0.906	0.090	0.909	0.085	0.914
H25	0.086	0.913	0.114	0.885	0.114	0.885	0.113	0.886	0.111	0.888	0.112	0.887	0.103	0.896	0.094	0.905
H26	0.078	0.921	0.098	0.901	0.098	0.901	0.097	0.902	0.097	0.902	0.097	0.903	0.092	0.907	0.085	0.914
H27	0.827	0.917	0.087	0.912	0.087	0.912	0.087	0.912	0.087	0.912	0.087	0.915	0.084	0.915	0.083	0.916
H28	0.112	0.888	0.090	0.909	0.089	0.910	0.091	0.908	0.092	0.907	0.091	0.908	0.098	0.901	0.106	0.893

Таблица 4. Значения валентных углов между атомами в молекуле 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетразабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7

	Растворитель							
	Газ	H ₂ O Вода	C ₂ H ₆ SO Диметилсульфоксид	CH ₃ OH Метанол	C ₂ H ₅ OH Этанол	(CH ₃) ₂ CO Ацетон	CHCl ₃ Хлороформ	C ₆ H ₁₂ Гексан
C ₁ -N ₂ -C ₃	110.67	108.69	108.76	108.53	108.58	108.73	110.69	110.55
N ₂ -C ₃ -N ₄	110.84	112.45	112.36	112.47	112.36	112.36	111.51	111.20
N ₂ -C ₁ -C ₂	103.47	104.35	104.40	104.41	104.41	104.39	103.25	103.41
C ₁ -C ₂ -N ₅	103.07	103.51	103.59	103.44	103.48	103.57	103.50	103.34
C ₂ -N ₅ -C ₇	111.97	110.58	110.50	110.69	110.63	110.58	110.72	111.21
N ₂ -C ₁ -N ₅	118.18	116.68	116.73	116.53	116.67	116.68	117.63	117.81
N ₂ -C ₃ -O ₉	124.95	125.04	125.10	124.99	125.21	125.06	124.84	124.89
N ₅ -C ₇ -O ₁₀	123.25	122.99	123.13	123.02	122.93	123.19	123.41	123.35
C ₁ -N ₂ -C ₁₁	121.77	116.42	116.75	115.58	115.97	116.65	122.49	121.81
N ₂ -C ₁₁ -C ₁₂	113.81	115.00	114.66	115.06	115.31	114.63	113.99	113.83
C ₁ -N ₅ -C ₁₃	119.56	120.00	120.64	119.81	119.30	120.67	121.28	120.19
N ₅ -C ₁₃ -C ₁₄	113.57	113.78	113.55	113.82	114.16	113.51	113.40	113.49
N ₂ -C ₁ -H ₁₅	111.49	111.59	111.50	111.78	111.52	111.57	111.36	111.55
C ₂ -N ₄ -H ₁₆	118.91	120.12	119.95	120.36	119.97	119.99	118.94	119.04
C ₁ -C ₂ -H ₁₇	111.73	112.24	112.18	112.32	112.04	112.19	111.89	111.76
C ₂ -N ₅ -H ₁₈	124.73	122.46	122.45	122.59	122.35	122.59	122.63	123.56
N ₂ -C ₁₁ -H ₁₉	109.00	110.118	110.19	110.21	110.19	110.25	108.67	108.89
N ₂ -C ₁₁ -H ₂₀	108.48	106.00	106.23	105.84	105.71	106.23	108.24	108.43
C ₁₁ -C ₁₂ -H ₂₁	108.54	108.17	108.16	108.18	108.40	108.16	108.40	108.49
C ₁₁ -C ₁₂ -H ₂₂	111.29	111.38	111.49	111.36	111.22	111.49	111.25	111.31
C ₁₁ -C ₁₂ -H ₂₃	110.57	111.11	111.02	111.12	111.11	111.00	110.90	110.70
N ₂ -C ₁₁ -H ₂₄	110.75	110.49	110.31	110.59	110.58	110.30	110.10	110.44
N ₅ -C ₁₃ -H ₂₅	107.00	106.85	107.32	106.74	106.36	107.34	107.58	107.222
C ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₆	108.32	108.14	108.15	108.13	108.32	108.13	108.30	108.29
C ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₇	111.21	111.37	111.41	111.38	111.27	111.43	111.16	111.27
C ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₈	110.85	111.02	110.94	111.02	111.00	110.92	110.99	110.84

Таблица 5. Распределение электронов на атомных орбиталях молекулы 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазицикло[3,3,0]-октандиона-3,7 в разных растворителях

Атом	Газ				H ₂ O, Вода				C ₂ H ₅ SO, Диэтилсульфоксид				CH ₃ OH Метанол			
	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z
C1	1.246	0.806	0.915	0.928	1.259	0.814	0.931	0.929	1.259	0.814	0.934	0.915	1.260	0.816	0.930	0.931
N2	1.511	1.063	1.072	1.707	1.554	1.086	1.072	1.598	1.553	1.085	1.079	1.600	1.559	1.086	1.074	1.587
C3	1.216	0.857	0.800	0.747	1.221	0.850	0.813	0.702	1.221	0.850	0.813	0.703	1.221	0.850	0.814	0.704
N4	1.523	1.043	1.097	1.715	1.525	1.042	1.117	1.694	1.526	1.043	1.117	1.694	1.523	1.043	1.117	1.697
C5	1.237	0.849	0.911	0.881	1.249	0.850	0.898	0.903	1.243	0.846	0.897	0.908	1.249	0.852	0.869	0.899
N6	1.476	1.632	1.095	1.221	1.509	1.607	1.035	1.173	1.509	1.596	1.099	1.179	1.507	1.612	1.094	1.172
C7	1.219	0.783	0.795	0.822	1.220	0.746	0.811	0.810	1.219	0.749	0.810	0.808	1.219	0.746	0.811	0.811
N8	1.560	1.480	1.088	1.160	1.549	1.503	1.031	1.153	1.545	1.501	1.097	1.157	1.550	1.506	1.089	1.151
O9	1.917	1.114	1.805	1.508	1.915	1.162	1.813	1.595	1.915	1.168	1.818	1.599	1.915	1.168	1.817	1.591
O10	1.917	1.448	1.837	1.448	1.915	1.556	1.869	1.171	1.915	1.552	1.869	1.173	1.916	1.556	1.868	1.167
C11	1.218	0.945	0.881	0.958	1.226	0.955	0.908	0.943	1.226	0.955	0.910	1.948	1.226	0.957	0.919	0.945
C12	1.230	0.926	1.008	0.993	1.228	0.926	1.035	1.036	1.228	0.928	0.033	1.036	1.228	0.925	1.035	1.037
C13	1.221	0.967	0.854	0.979	1.223	0.971	0.841	0.995	1.223	0.971	0.844	0.991	1.823	0.972	0.839	0.997
C14	1.229	0.985	0.989	1.019	1.229	0.920	1.002	1.011	1.230	0.988	0.997	1.016	1.229	0.901	1.001	1.011
H15	0.868				0.816				0.817				0.818			
H16	0.755				0.708				0.709				0.708			
H17	0.864				0.807				0.808				0.809			
H18	0.738				0.701				0.701				0.702			
H19	0.906				0.905				0.905				0.906			
H20	0.918				0.886				0.886				0.887			
H21	0.918				0.901				0.901				0.901			
H22	0.921				0.910				0.910				0.910			
H23	0.897				0.909				0.909				0.909			
H24	0.920				0.906				0.905				0.906			
H25	0.913				0.885				0.885				0.886			
H26	0.921				0.901				0.901				0.902			
H27	0.917				0.912				0.912				0.912			
H28	0.887				0.909				0.910				0.908			

Атом	C ₂ H ₅ OH Этанол				(CH ₃) ₂ CO Ацетон				CHCl ₃ Хлороформ				C ₆ H ₁₂ Гексан			
	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z	2S	2P _x	2P _y	2P _z
C1	1.960	0.816	0.930	0.933	1.258	0.815	0.932	0.926	1.251	0.798	0.926	0.921	1.249	0.803	0.919	0.928
N2	1.558	1.086	1.073	1.550	1.554	1.085	1.074	1.597	1.501	1.068	1.082	1.717	1.511	1.067	1.069	1.703
C3	1.222	0.850	0.813	0.704	1.221	0.851	0.813	0.705	1.212	0.812	0.803	0.718	1.215	0.854	0.801	0.733
N4	1.526	1.042	1.116	1.694	1.525	1.043	0.117	1.695	1.530	1.040	1.110	1.698	1.525	1.042	1.106	1.708
C5	1.248	0.854	0.899	0.898	1.249	0.847	1.899	0.906	1.248	0.848	0.902	0.901	1.243	0.849	0.907	0.891
N6	1.510	1.618	1.091	1.167	1.508	1.602	0.097	1.179	1.509	1.619	1.088	1.174	1.496	1.635	1.086	1.185
C7	1.220	0.746	0.812	0.812	1.219	0.750	1.810	0.810	1.218	0.755	0.808	0.814	1.219	0.767	0.803	0.820
N8	1.553	1.504	1.088	1.150	1.545	1.503	0.095	1.157	1.538	1.523	1.082	1.170	1.551	1.504	1.082	1.162
O9	1.915	1.169	1.814	1.586	1.915	1.166	1.817	1.587	1.916	1.137	1.826	1.582	1.917	1.126	1.814	1.541
O10	1.916	1.551	1.867	1.166	1.916	1.548	1.867	1.170	1.916	1.523	1.860	1.157	1.916	1.489	1.847	1.145
C11	1.226	0.957	0.910	0.947	1.225	0.956	1.912	0.945	1.220	0.951	0.871	0.968	1.219	0.949	0.880	0.960
C12	1.228	0.924	1.036	1.037	1.228	0.928	0.033	1.036	1.231	0.999	1.014	0.992	1.231	0.998	1.008	0.994
C13	1.223	0.972	0.839	0.998	1.223	0.971	1.841	0.993	1.222	0.977	0.830	0.993	1.221	0.972	0.840	0.988
C14	1.229	0.993	1.001	1.007	1.230	0.988	0.997	1.017	1.230	0.982	0.995	1.023	1.229	0.984	0.991	1.022
H15	0.820				0.820				0.833				0.851			
H16	0.711				0.711				0.724				0.739			
H17	0.810				0.811				0.825				0.845			
H18	0.704				0.703				0.717				0.729			
H19	0.906				0.906				0.896				0.900			
H20	0.887				0.887				0.896				0.908			
H21	0.901				0.902				0.905				0.912			
H22	0.910				0.909				0.918				0.920			
H23	0.908				0.908				0.905				0.900			
H24	0.906				0.906				0.909				0.914			
H25	0.888				0.887				0.896				0.905			
H26	0.902				0.902				0.907				0.914			
H27	0.912				0.912				0.915				0.916			
H28	0.907				0.908				0.901				0.893			

Из данных квантово-химических расчетов видно, что самые высокие значения длин связей имеют R_{1,2} (R_{1,8}) и R_{4,5} (R_{5,6}) (в пределах 1,478 (1,472) и 1,458 (1,457) Å), а значения соответствующих валентных углов α_{2,3,9}=125.04, α_{6,7,10}=122.99, α_{1,8,13}=120.00.

Такое разнообразие в межатомных расстояниях и валентных углов, указывает на влияние растворителей на линейные и угловые параметры в молекуле 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандион-3,7.

Наибольшей величиной электронной плотности характеризуются атомы кислорода O(9) и O(10). Известно, что так называемые p -электроны находятся на негибридизированной p -орбитали атомов кислорода [2], а другая свободная пара электронов находится на sp -гибридной орбитали и благодаря ярко выраженному s -характеру, значительно удерживаются данной орбиталью (заселенность 1.915-1.917) (табл. 1).

Таким образом, молекула 2,8-диэтил-2,4,6,8-тетраазабицикло[3,3,0]-октандиона-3,7 может координироваться как монодентатно через атом O(9) или O(10), так и бидентатно посредством обоих атомов кислорода и осуществлять мостиковую функцию.

Рентгеноструктурное исследование 2,8-ДЭТАБОД [3] показало, что структура состоит из пятичленных димеров (рис. 2). Расположение этих молекул на плоскости a и b представлено на рис. 3. В данной структуре атом O(3A) акцептирует две связи, атомы O(7B) и O(7A) – по одной каждый, а атом O не участвует в водородных связях. Эти водородные связи показаны на рис. 3.

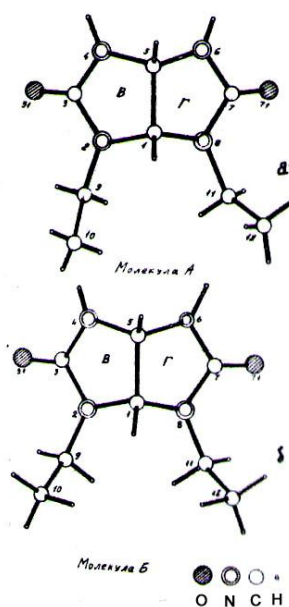


Рис. 2. Структура соединения 2,8-ДЭТАБОД по [3].

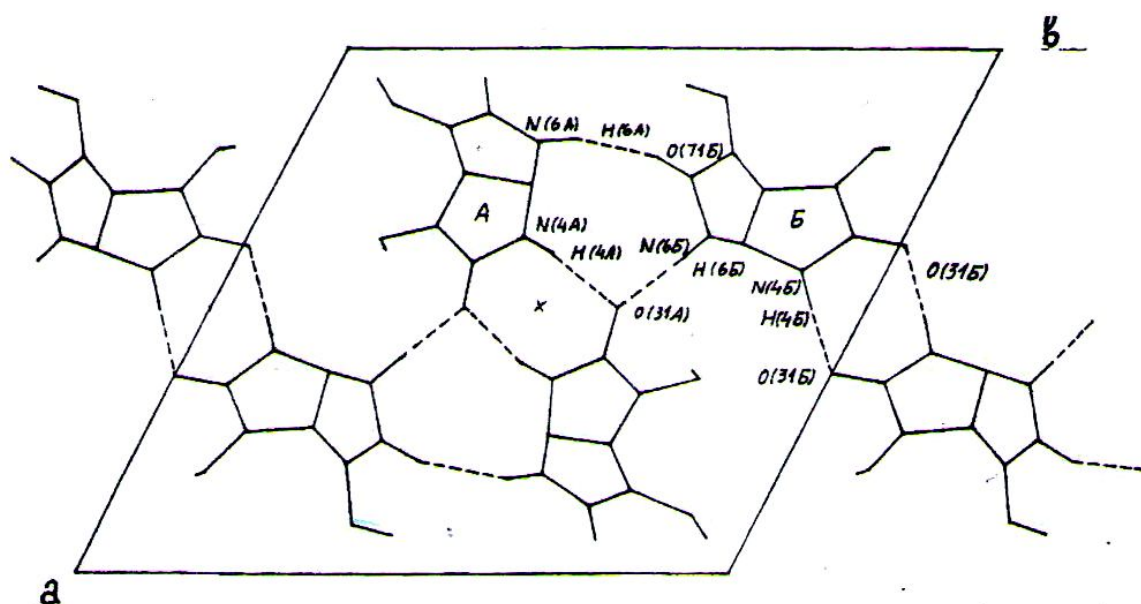


Рис. 3. Проекция структуры 2,8-ДЭТАБОД (L') на плоскость ab (расположение молекулы А и Б штриховыми линиями показаны водородные связи) [3].

Как видно из рис. 3, образуются системы водородных связей [3], которые приведены в таблице 6.

Таблица 6. Водородные связи в структуре 2,8-ДЭТАБОД.

Соединение	Связи D-H...A	d, Å			$\angle(\text{DH}, \text{A})$
		D-H	H...A	D...A	
2,8-ДЭТАБОД	$\text{N}_{(4\text{A})}-\text{H}_{(4\text{A})}\dots\text{O}_{(3\text{A})}^{\text{xx}}$	0.75(3)	2.17(3)	2.812(5)	169(6)
	$\text{N}_{(6\text{A})}-\text{H}_{(6\text{A})}\dots\text{O}_{(3\text{B})}$	0.84(4)	2.08(4)	2.890(5)	158(3)
	$\text{N}_{(4\text{B})}-\text{H}_{(4\text{B})}\dots\text{O}_{(3\text{B})}$	0.77(3)	2.12(3)	2.892(4)	173(3)
	$\text{N}_{(6\text{B})}-\text{H}_{(6\text{B})}\dots\text{O}_{(3\text{A})}$	0.80(4)	1.96(4)	2.837(5)	162(4)

Естественно, при образовании координационной связи Me–O разрушаются водородные связи, которые показаны на рис. 3.

Изучение ИК-спектров координационных соединений показало, что по их данным можно определить типы координации молекулы 2,8-ДЭТАБОД.

С учетом квантовохимических, рентгеноструктурных и спектральных (ИК и КР) данных электронного строения, стереохимии и колебательных спектров 2,8-ДЭТАБОД и его комплексов удалось установить критерии определения способа координирования молекул ДЭТАБОД с металлами (табл. 7).

В таблице 7 приводятся данные о комплексах некоторых металлов 2,8-ДЭТАБОД. Во всех соединениях 2,8-ДЭТАБОД монодентатны и координируются с металлами через атомы кислорода группы C=O.

Еще одним подтверждением координирования 2,8-ДЭТАБОД через атомы кислорода может служить повышение $\nu(\text{CN})$ ($1508\text{--}1545\text{ см}^{-1}$) по сравнению со свободным лигандом ($\sim 1500\text{ см}^{-1}$). Повышение $\nu(\text{CN})$ в спектрах этих соединений указывает на координацию 2,8-ДЭТАБОД через атомы кислорода карбонильных групп.

Таблица 7. Колебательные частоты (см^{-1}) найденные в ИК спектрах 2,8-ДЭТАБОД (L') его комплексов Li, Zn, Mg и Cd

Соединение	$\nu(\text{CO})$		$\nu(\text{CN})$	
	ИК	КР	ИК	КР
2,8-ДЭТАБОД	1702	1684 1666	1502	–
$\text{LiCl}L'(\text{H}_2\text{O})$	1715 1995п 1670 1640п	1718 1676	2995 2955 2895 2838	2967 2934 2876
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2L'(\text{H}_2\text{O})$	1705	–	2890 2840п 2990 2950	–
$\text{ZnCl}_2L'(\text{H}_2\text{O})$	1682,1642 1617п	–	3000, 2985 2975, 2943 2898, 2884	2997, <u>2986</u> 2938, 2878
$\text{Zn}(\text{NCS})_2L'(\text{H}_2\text{O})$	<u>1682</u> , 1665	–	2987, 2934, 2880	–
$\text{ZnI}_2L'(\text{H}_2\text{O})$	1675,1645 1630п	2893, 2876	2992п, 2983, 2942 2879, 2856	2979, 2969, <u>2935</u>
$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2L'$	–	–	–	<u>2976</u> <u>2943</u> 2882

Результаты спектральных исследований (ИК и КР спектров) и квантово-химических расчетов хорошо согласуются друг с другом в отношении способа координирования атомов металлов с молекулой 2,8-ДЭТАБОД посредством атомов кислорода карбонильных групп.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Dewar M.I.S., Zoebich E.G., Rcoly E.F., Stewart I. AM1: A new purpose quantum mechanical molekular model. A. Amer. Chem. soc. p. 3902-3909.
2. Химическая связь. Маррел Дж., Кент С., Тедер Дж. М. Мир 1980. 383с.
3. 3. М.Г.Цинцадзе. Координационные соединения металлов с азот- и кислородсодержащими лигандами производными алифатического, ароматического и гетероциклического ряда. Изд-во Национальной АН Грузии, Тбилиси, 2008. 248 с.

ბამსსნელის გავლენა 2,8-დიეტილ-2,4,6,8-ტეტრააზაბიციკლო[3,3,0]-ოქტანდიონ-3,7 კომპლექსწარმოქმნის უნარზე

მაია ცინცაძე^{*,**}, დიმიტრი ლოხოშვილი^{*}, გივი ცინცაძე^{**}, ნანა გეგეშიძე^{**},
ილია გველესიანი^{**}, ლალი გოლოძე^{**}

**ივ.ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
რ.აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი
**საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი*

რეზიუმე

კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით გამოთვლილია 2,8-დიეტილ-2,4,6,8-ტეტრააზაბიციკლო[3,3,0]-ოქტანდიონ-3,7 ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები. ელექტრონული სტრუქტურის მიხედვით დადგენილია გამსსნელის გავლენა ლითონებთან მისი კომპლექსწარმოქმნის უნარზე.

SOLVENT EFFECT ON COMPLEX FORMATION ABILITY OF 2,8-DIETIL-2,4,6,8-TETRAAZABICYCLO[3,3,0]-OCTANDION-3,7 WITH METALS

Maia Tsintsadze^{*,**}, Dimitri Lochoshvili^{*}, Givi Tsintsadze^{**}, Nana Gegeshidze^{**},
Ilia Gvelesiani, Lali Golodze^{**}

**I.Javakhishvili Tbilisi State University
R.Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry
**Georgian Technical University*

SUMMARY

Energetic, geometric and structural characteristics of 2,8-dietil-2,4,6,8-tetraazabicyclo[3,3,0]-octandion-3,7 are determined by quantum chemical method AM1. According to electronic structure, solvent effect on its complex formation ability with metals is established.

**ინფორმაცია საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზარზე არსებული
ანტიდიაბეტური პრეპარატების შესახებ**

თამარ ცინცაძე, თამარ სალარეიშვილი*, ილია გველესიანი, დარეჯან გულბანი**,
ნათუნა წიქარიშვილი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

*თბილისის სახელმწიფო სამედიცინო უნივერსიტეტის იოველ ქუთათელაძის ფარმაცოქიმიის
ინსტიტუტი

**სოხუმის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

განალიზებულია შაქრიანი დიაბეტის გავრცელება საქართველოში. თანაფარდობის ცვლილება ტიპ 1 და ტიპ 2 დიაბეტს შორის საერთო კონტინგენტის და ახალი შემთხვევების დროს ტიპი 2-ისკენ იხრება და შეადგენს შესაბამისად 71.76-74.91 და 67.63-74.69%-ს. საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზარზე პერორალური ჰიპოგლიკემიური პრეპარატების ფასების შედარებით ანალიზით შეფასებულია ადგილობრივი მცენარეული ნედლეულიდან მომზადებული პრეპარატ სატურინის კონკურენტუნარიანობა.

თანამედროვე სამედიცინო პრაქტიკაში დიდი მნიშვნელობა აქვს ფარმაცევტული ინფორმაციის მოპოვებას შაქრიანი დიაბეტის შესახებ, რადგან შაქრიანი დიაბეტი (შდ) ითვლება სიკვდილიანობის სიხშირით მესამე მიზეზად გულ-სისხლძარღვთა დაავადებებისა და ავთვისებიანი სიმსივნის შემდეგ. იგი ენდოკრინულ დაავადებათა შორის ერთ-ერთ გავრცელებულ აქტუალურ სამედიცინო-სოციალურ პრობლემას წარმოადგენს [1].

ანტიდიაბეტური პრეპარატების ძირითადი ნაწილი არის სინთეზური მედიკამენტები, სულფანილმარდოვანას და ბიგუანიდების ნაწარმების სახით, დამახასიათებელი გვერდითი მოქმედებებით, ამიტომ აუცილებელია შეიქმნას ისეთი პრეპარატები, რომლებსაც ექნებათ მკურნალობის დიდი ეფექტი, არასასურველი მოვლენების მინიმუმამდე დაყვანით, რაც დღეისათვის თითქმის დეფიციტურია [2].

ასეთი სახის მედიკამენტებს წარმოადგენს მცენარეული ნედლეული და მათგან მიღებული ფიტოპრეპარატები [3].

ფიტოთერაპიით მკურნალობა განსაკუთრებით გამართლებულია ისეთ ავადმყოფებში, როდესაც შაქრიანი დიაბეტი (ტიპი 2) მიმდინარეობს სხვა დაავადების ფონზე, ამ დროს ხელი ეშვება მრავალი გართულების წარმოქმნას ან მცირდება კლინიკური გამოხატვა.

საქართველოში და მის ფარგლებს გარეთ მოზარდ მრავალ მცენარეს გააჩნია ანტიდიაბეტური აქტივობის სხვადასხვა ხარისხი. ისინი ძირითადად გამოიყენებიან გამონაცემის სახით, რომლებიც არამდგრადი წამლის ფორმაა. მეორე მხრივ, არასრული და არახუსტი დოზირებით.

სსიპ თბილისის სახ. სამედიცინო უნივერსიტეტის იოველ ქუთათელაძის ფარმაცოქიმიის ინსტიტუტში აკადემიკოს ეთერ ქემერტელიძის ხელმძღვანელობით საქართველოში მოზარდი ბალის ქონდრისგან – *Satureja hortensis* L.-ისგან ფარმაცოლოგიური, კლინიკური და ქიმიური კვლევების საფუძველზე შექმნილია ჰიპოგლიკემიური მოქმედების ბიოლოგიურად აქტიური კვების დანამატი. პრეპარატს სატურინი ეწოდა. სატურინი 0.33გ კაფსულა №60 ამჟამად რეგისტრირებულია საქართველოს შრომის, ჯანმრთელობისა და სოციალური დაცვის სამინისტროს სამედიცინო საქმიანობის სახელმწიფო რეგულირების სააგენტოს №823/ო ბრძანების საფუძველზე, როგორც მცენარეული ნედლეულიდან მომზადებული ტიპი 2 დიაბეტისათვის პარასამკურნალო საშუალება [1,4,5].

სატურინი მცენარის მშრალი წყლიანი ექსტრაქტის და ფოთლების წვრილდისპერსიული ფხვნილების 1 : 2 ნარევის კაფსულირებული ფორმაა.

კვლევის ობიექტად აღებული იყო საქართველოში ტიპი 2 შდ-ით დაავადებულთა სტატისტიკური მონაცემები და ფარმაცევტულ ბაზარზე არსებული ანტიდიაბეტური პრეპარატები 2005-2011 წწ პერიოდისათვის. ინფორმაციის წყაროდ აღებულია სამთავრობო ორგანიზაციების მიერ ჩატარებული აღწერები, სტატისტიკური მონაცემები, რომელთა გამოსათვლელად გამოყენებულია გაეროს და ჯანმრთელობის მსოფლიო ორგანიზაციის მიერ რეკომენდებული მეთოდოლოგიები [6-8].

საქართველოში 2005-2011 წწ. ენდოკრინული სისტემის, კვებისა და ნივთიერებათა ცვლის დარღვევით გამოწვეული დაავადებების და შდ-ის სტატისტიკური მონაცემები ნაჩვენებია ცხრილში 1.

ცხრილი 1. ენდოკრინული სისტემის, კვებისა და ნივთიერებათა ცვლის დარღვევით გამოწვეული დაავადებების და შაქრიანი დიაბეტის სტატისტიკური მონაცემები საქართველოში 2005-2011 წწ

წლები	№	წლის ბოლოს (კონტინგენტი)	ცვლილება წლების მიმართ, (%-ში)	პრევალ- ენტობა	ახალი შემთხვევები	ცვლილება წლების მიმართ, (%-ში)	ინციდენ- ტობა
2005	I	137216	-	3138.9	31843	-	720.2
	II	55080	-	1250.0	9492	-	217.1
	III	15203(27.60%)	-	347.8	2830(29.81%)	-	64.7
	IV	39877(72.40%)	-	912.2	6662(70.19%)	-	152.4
2006	I	124016	-9.62	2819.8	27660	-13.14	628.9
	II	58582	6.36	1332.0	8151	-14.13	185.3
	III	15961(27.25%)	4.99	362.9	2391(29.33%)	-15.51	54.4
	IV	42621(72.75%)	6.88	969.1	5760(70.66%)	-13.54	131.0
2007	I	118812	-4.20	2707.4	27307	-1.27	622.3
	II	59875	2.21	1364.4	7461	-8.47	170.0
	III	16686(27.87%)	4.54	380.2	2415(32.37%)	1.00	55.0
	IV	43189(72.13%)	1.33	984.2	5046(67.63%)	-12.40	115.0
2008	I	119864	0.89	2734.2	30580	11.99	697.6
	II	64442	7.63	1470.0	9425	26.32	215.0
	III	17817(27.65%)	6.78	406.4	2630(27.90%)	8.90	60.0
	IV	46625(72.35%)	7.96	1063.6	6795(72.10%)	34.66	155.0
2009	I	124793	4.11	2829.2	40054	30.98	908.1
	II	68914	6.94	1562.4	11127	18.06	252.3
	III	19461(28.24%)	9.23	441.2	3390(30.47%)	28.90	76.9
	IV	49453(71.76%)	6.07	1121.2	7737(69.53%)	13.86	175.4
2010	I	129731	3.96	2913.5	43545	8.72	977.9
	II	71205	3.32	1599.1	11026	-0.91	247.6
	III	17517(24.60%)	-9.99	393.4	2894(26.47%)	-14.63	65.0
	IV	52776(74.12%)	6.72	1185.2	7756(70.34%)	0.25	174.2
2011	I	140267	8.12	3128.6	41141	-5.45	917.6
	II	76679	7.69	1708.9	12606	14.33	281.2
	III	17889(23.33%)	2.12	299.0	2754(21.85%)	-4.84	61.4
	IV	57442(74.91%)	8.84	1281.2	9415(74.69%)	21.39	210.0

I - ენდოკრინული სისტემის, კვებისა და ნივთიერებათა ცვლის დარღვევით გამოწვეული დაავადებები;
 II - შაქრიანი დიაბეტი; III - შაქრიანი დიაბეტი ინსულინდამოკიდებული (ტიპი 1), (%), საერთო რაოდენობის მიმართ); IV - შაქრიანი დიაბეტი ინსულინდამოკიდებული (ტიპი 2), (%), საერთო რაოდენობის მიმართ)

ენდოკრინული სისტემის დაავადებების, კვებისა და ნივთიერებათა ცვლის დარღვევების დიაგნოზით დაავადებულთა შეფასებამ აღნიშნული წლების მიმართ არჩენა, მაჩვენებელთა შესამჩნევი ზრდა 2009 წლიდან. 2005 წელთან შედარებით 2006 წელს კონტინგენტი და ახალი შემთხვევები მცირდება შესაბამისად 9.62 და 13.14%-ით. 2007-ში 2006-თან შედარებით ასევე მცირდება 4.20 და 1.27%-ით. 2008-ში 2007-თან შედარებით უკვე მატულობს შესაბამისად 0.89 და 11.99%-ით, 2009-ში 2008-თან შედარებით 4.11 და 30.98%-ით, 2010-ში 2009-თან შედარებით 3.96 და 8.72%. 2011-ში 2010-თან შედარებით კონტინგენტი მატულობს 8.12%-ით და ახალი შემთხვევები მცირდება 5.45%-ით.

ენდოკრინულ პათოლოგიებს შორის შაქრიანი დიაბეტის გავრცელების მიხედვით პირველი ადგილი უკავია. ეს აღიარებული ფაქტია და დაახლოებით 50%-ზე მეტს შეადგენს, განსაკუთრებით 2007 წლიდან (50.39; 53.76; 55.22; 54.88% შესაბამისად). 2011 წლიდან იგი 54.67% შეადგენს.

2005-2011 წლებში საქართველოში აღინიშნება შდ-ს შემთხვევათა რაოდენობის მატება. რაც შეეხება ახალ შემთხვევებს 2008, 2009, 2011 წლებში წინა წელთან შედარებით მატულობს შესაბამისად 26.32; 18.6; 14.33%-ით.

თანაფარდობა ტიპ 1-სა და ტიპ-2 შორის საერთო კონტინენტის და ახალი შემთხვევების დროს ტიპი 2-ისკენ იხრება და წინა წლებთან შედარებით ზრდის ტემპით აღინიშნება. იგი შესაბამისად შეადგენს 71.76-74.91 და 67.63-74.69%-ს.

2010 წელს საქართველოს სტატისტიკის დეპარტამენტის მონაცემებით საქართველოს მოსახლეობის საშუალო წლიური რიცხოვნება 4452800 ადამიანს შეადგენდა.

ამავე პერიოდისთვის რეგისტრირებული იყო შაქრიანი დიაბეტის 71205, ხოლო ტიპი 2-ის 52776 შემთხვევა, რაც შესაბამისად მოსახლეობის რაოდენობის 1.6 და 1.18%-ს წარმოადგენს. 2011 წლისთვის ეს მონაცემები შესაბამისად 1.71 და 1.28%, ვინაიდან ამ პერიოდისთვის მოსახლეობა 4483400 ადამიანს შეადგენდა, შდ-ის შემთხვევა - 76679, ხოლო ტიპი 2 – 57442. ამგვარად, აღინიშნება შაქრიანი დიაბეტის, მათ შორის ტიპი 2 დიაბეტის პრევალენტობის და ინციდენტობის მატების ტენდენცია [8].

საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზარზე შდ-ის სამკურნალო საშუალებებიდან, პერორალური ჰიპოგლიკემიური პრეპარატები და მათი ერთი ტაბლეტის/კაფსულის ფასი ლარებში მოცემულია ცხრილში 2.

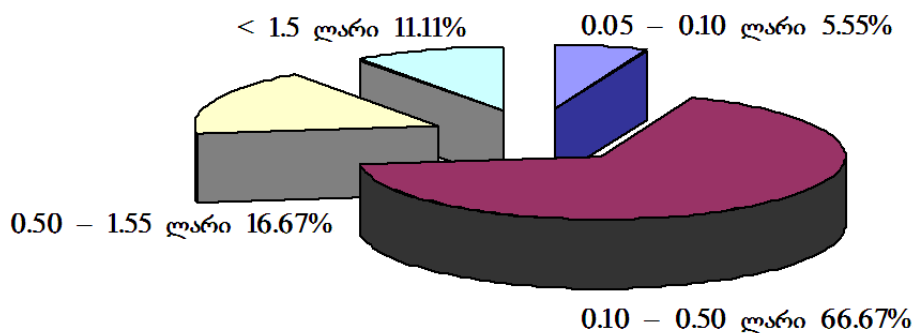
საქართველოში პერორალური ანტიდიაბეტური პრეპარატებიდან შემუშავებული და რეგისტრირებულია saturin-ი და bludiabin-ი არ წარმოადგენენ სინთეზურ პრეპარატებს.

საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზრის ინფორმაციით (ცნობარი ვიდალი 2009/2010 სამკურნალო პრეპარატები საქართველოში), დაკვირვებით და გამოკითხვებზე დაყრდნობით, ძირითადად 14 ფირმის 18 პრეპარატია. ისინი ბაზრის ფასის (პრეპარატთა ერთი ტაბლეტის/კაფსულის ფასის გათვალისწინებით) მიხედვით დაყვავით შემდეგ 4 სეგმენტად: 0.05 - 0.10 ლარი 5.55%; 0.10 - 0.50 ლარი 66.67%; 0.50 - 1.50 ლარი 16.67%; 1.5 < ლარი 11.11%.

ჩვენთვის მიზნობრივი ბაზარია 0.1-0.50 ლარიანი სეგმენტი. ბაზრის ამ სეგმენტზე ჩვენი პრეპარატის უპირატესობა ის არის რომ იგი ფიტოპრეპარატია დაბალი ფასით. თითოეულის წილი მთლიანი ბაზარისათვის მოცემულია ნახაზი 1. ამგვარად, პრეპარატების ფასების შედარებითი ანალიზი აჩვენებს პრეპარატ სატურინის კონკურენტუნარიანობას.

ცხრილი 2. საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზარზე ძირითადი პერორალური ჰიპოგლიკემიური პრეპარატები ერთი ტაბლეტის/კაფსულის ფასით

შახელმწიფო	ფირმის დასახელება	პრეპარატის დასახელება	ტაბლეტის/კაფსულის ფასი ლარებში	
დიდი ბრიტანეთი	GlaxoSmithKline	Avandamet	1.81	
გერმანია	Berlin-chemie-menarini	Glimil	0.26	
		Maninil	0.07	
		Siofor	0.25	
გერმანია/საფრანგეთი	Bayer	Glucobuy	0.61	
		Sanofi aventis	Amaryl	0.43
უნგრეთი	Egis Pharmaceutical PLC	Amaryl M	0.92	
		Glempid	0.45	
		Gedeon Richter	Roglit	1.75
საბერძნეთი	Boehringer ingeheim Ellas	Glurenorm	0.34	
საფრანგეთი	Servier	Diabeton MR	0.31	
		Merck/Lipa-Sante	Glucophage	0.37
		Glucovance	0.43	
არგენტინა	Laboratorios Bago S.A.	Glemaz	1.16	
თურქეთი	Ali Raif Ilac San	Mepril	0.38	
საქართველო	GM pharmaceuticals	Glucoton	0.18	
		Aversi-Racional	Sioral retard	0.30
		შპს მანა	ბლუდაბინ	0.38
	იოველ ქუთათელაძის ფარმაკოქიმიის ინსტიტუტი	Saturin	0.15 (0.25)	



ნახ. 1. საქართველოს ფარმაცევტულ ბაზარზე პერორალური ჰიპოგლიკემიური პრეპარატების ფასების განაწილება (პრეპარატთა ერთი ტაბლეტის/კაფსულის ფასის გათვალისწინებით)

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Кемертелидзе Э.П., Сагареишвили Т.Г., Сыров В.Н., Хушбакова З.А., Цуцкиридзе Л.Р., Курашвили З.Б. Сатурин – эффективное растительное средство при лечении сахарного диабета 2 типа. *Georgian Medical News*, 203, 2012, 247-252.
2. ცნობარი ვიდალი 2009/2010. სამკურნალო პრეპარატები საქართველოში. მეოთხე გამოცემა, ფარმინფორმი, 2009, 1505გვ.
3. სხირტლაძე ა. საზოგადოების სოციალურ-ეკონომიკური პრობლემები და ფარმაცევტული ბიზნესის ეფექტიანი ფუნქციონირების გზები. მონოგრაფია. თბილისი, 2010, 167გვ.
4. Кемертелидзе Э.П., Сагареишвили Т.Г., Сыров В.Н., Хушбакова З.А., Химический состав и фармакологическая активность листьев чабера садового (*Satureja hortensis* L.), произрастающего в Грузии. *Химико-фармац. журнал*, 2004, 38, 36, 33-35.
5. საღარეიშვილი თ. ფენოლური ნაერთები და ეთეროვანი ზეთები საქართველოში მოზარდ და ინტროდუცირებულ ზოგიერთ უმაღლეს მცენარეში., მონოგრაფია. თბილისი, იოველ ქუთათელაძის ფარმაკოქიმიის ინ-ტი, 2008, 213გვ.
6. ჯანმრთელობის დაცვა. სტატისტიკური ცნობარი 2009, საქართველო, 2010, 180გვ.
7. ჯანმრთელობის დაცვა. სტატისტიკური ცნობარი 2010, საქართველო, 2011, 239გვ.
8. ჯანმრთელობის დაცვა. სტატისტიკური ცნობარი 2011, საქართველო, 2012, 198გვ.

INFORMATION ON ANTI-DIABETIC DRUGS AT GEORGIAN PHARMACEUTICAL MARKET

Tamar Tsintsadze, Tamar Sagareishvili*, Ilia Gvelesiani, Daredjan Gulbani**, Khatuna Tsikarishvili
Georgian Technical University

*Iovel Kutateladze Institute of Pharmacochimistry of Tbilisi State Medical University

**Sokhumi State University

SUMMARY

Spread of diabetes mellitus in Georgia was analyzed. Type 1 and type 2 diabetes ratio in total contingent and new cases trends to the latter and makes 71.76-74.91 and 67.63-74.69%, respectively. The comparative analysis of oral hypoglycemic drugs prices at Georgian pharmaceutical market revealed the competitiveness of the preparation *Saturin* developed from local herbal raw.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АНТИДИАБЕТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ НА ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОМ РЫНКЕ ГРУЗИИ

Т.Г.Цинцадзе, Т.Г.Сагареишвили*, И.О.Гвелесиани, Д.В.Гулбани**, Х.Дж.Цикаришвили

Грузинский технический университет

*Институт фармакохимии им. И.Г.Кутателадзе Тбилисского Государственного Медицинского Университета

**Сухумский государственный университет

РЕЗЮМЕ

Проанализировано распространение сахарного диабета в Грузии. Соотношение между диабетом типа 1 и 2, как в общем контингенте больных, так и в новых случаях, смещено в сторону последнего и составляет, соответственно, 71.76-74.91 и 67.63-74.69%. Сравнительным анализом цен пероральных гипогликемических препаратов на грузинском фармацевтическом рынке оценена конкурентноспособность препарата сатурина, приготовленного из местного растительного сырья.

საქართველოში მოზარდი ბაღის ქონდრის ფოთლების
(*Satureja hortensis* L.) ამინომჟავების შეღებნილობა

თამარ საღარეიშვილი, ილია გველეხიანი*, დარეჯან გულბანი**, დარეჯან ლულუნიშვილი*
თბილისის სახელმწიფო სამედიცინო უნივერსიტეტის იოველ ქუთათელაძის ფარმაცოქიმიის ინსტიტუტი

*საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

**სოხუმის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

მაღალეფექტური თხევადი ქრომატოგრაფიის მეთოდით შესწავლილია საქართველოში მოზარდი მცენარის ბაღის ქონდრის ამინომჟავების თვისობრივი და რაოდენობრივი შედგენილობა, დადგენილია, რომ ბაღის ქონდრის ფოთლების მშრალი წყლიანი ექსტრაქტი, რომელიც ჰიპოგლიკემიურ პრეპარატ სატურინის მთავარი კომპონენტია, შეიცავს 17 ამინომჟავას, პროლინის მაღალი შემცველობით.

საქართველოში მოზარდი მცენარე *Satureja hortensis* L. - ბაღის ქონდრი (ოჯახი Labiatae) ხასიათდება ფენოლური ნივთიერებების მდიდარი შედგენილობით. ფოთლებიდან გამოყოფილია ფლავონოიდები: აპიგენინი, ლუტეოლინი, ცინაროზიდი, ლუტეოლინ-გლუკურონიდი, ლუტეოლინ-რუტინოზიდი, იზოროიფოლინი; აგრეთვე ფენოლკარბონმჟავები – როზმარინის და ქლოროგენის მჟავები. მათი საერთო რაოდენობა 1.6-1.7% შეადგენს. ფოთლებიდან 1% ეთეროვანი ზეთია მიღებული, რომლის ძირითადი კომპონენტებია თიმოლი და მეთილკარვაკროლი [1-3].

ბაღის ქონდრის ფოთლებიდან მომზადებულ მშრალ წყლიან ექსტრაქტში შენარჩუნებულია მცენარეში არსებული ნივთიერებები ნატურალური სახით. ჩატარებულია აღნიშნული ექსტრაქტის ფარმაცოლოგიური თვისებების გამოკვლევა ინტაქტურ და ექსპერიმენტულად მოდელირებულ ალოქსანური დიაბეტით დაავადებულ საცდელ ცხოველებზე, ცნობილ ანტიდიაბეტურ პრეპარატ არფაზეტინთან შესადარებლად. დადგენილია ბაღის ქონდრის ფოთლების მშრალი წყლიანი ექსტრაქტის ამკარად გამოხატული ჰიპოგლიკემიური ეფექტურობა – პრეპარატი მნიშვნელოვნად აქვეითებს შაქრის დონეს სისხლში და სრულიად უვნებელია [2-5].

შემუშავებულია ბაღის ქონდრის ფოთლების მშრალი წყლიანი ექსტრაქტის მზა სამკურნალო ფორმა 0.33 გ კაფსულების სახით. პრეპარატს Saturin – სატურინი ეწოდა. თბილისში, დიაბეტის კვლევის ნაციონალურ ცენტრში სატურინის კლინიკური გამოკვლევებით დადასტურებულია მისი სტატისტიკურად სარწმუნო ანტიდიაბეტური მოქმედება 2 ტიპის დიაბეტის დროს [6].

ფენოლური ნაერთების და ეთეროვანი ზეთის იდენტიფიკაციის გარდა ბაღის ქონდრის ფოთლებში წინასწარი ანალიზით ქადალდის ქრომატოგრაფიაზე, სისტემაში: ნ-ბუთანოლ-ძმარმჟავა-წყალი (4:1:2) ნინჰიდრინის რეაქტივით აღმოჩენილი იქნა ამინომჟავები. მათგან ძირითადი ამინომჟავა იძლევა განსხვავებულ ნინჰიდრინის რეაქციას, ნაცვლად ლურჯ-იისფერისა ნარინჯისფერს და პროლინის სარწმუნო ნიმუშის პარალელურად მჟღავნდება [7].

ბაღის ქონდრის ფოთლების მშრალი წყლიანი ექსტრაქტის ორგანული გამხსნელებით დამუშავების შემდეგ მიღებულია 201.6 მგ%-ის გამოსავლით ამინომჟავების ჯამი, შესაბამისი მეთოდით [8], რომლის თვისობრივი და რაოდენობრივი შედგენილობა შევისწავლეთ მათი ფენილთიოკარბამიდის წარმოებულების მაღალეფექტური თხევადი ქრომატოგრაფიებით Waters Associates, Milpor MA (USA) სისტემის „Pico Tag“-ის ანალიზატორზე შიდა სტანდარტის მეთოდით. შედეგები მოცემულია ცხრილში. როგორც ცხრილიდან ჩანს, 17 ამინომჟავიდან ძირითადი კომპონენტია პროლინი (76.58%). პროლინი შეცვლადი ე.ი. ადამიანის და ცხოველის ორგანიზმში სინთეზირებადი ამინომჟავაა. საგულისხმოა, რომ იგი ცილოვანი ბუნების ჰორმონის – ინსულინის შემადგენლობაში შედის.

ბაღის ქონდრის ფოთლებში ამინომჟავები ჩვენს მიერ პირველად დასახსიათებული.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Сагарейшвили Т. Состав эфирных масел *Satureja hortensis*, *Leucanthemum vulgare*, *Abies nordmanniana*, произрастающих в Грузии. Химический журнал Грузии. 2006, 6(6), 689-693.
2. თ.საღარეიშვილი. ფენოლური ნაერთები და ეთეროვანი ზეთები საქართველოში მოზარდ და ინტროდუცირებულ ზოგიერთ უმაღლეს მცენარეში. თბილისი, იოველ ქუთათელაძის ფარმაცოქიმიის ინს-ტი, 2008, 213გვ., რეზ. რუს., ინგლ.

3. Кемертелидзе Э.П., Сагареишвили Т.Г., Сыров В.Н., Хушбактова З.А. Химический состав и фармакологическая активность листьев чабера садового (*Satureja hortensis* L.), произрастающего в Грузии. Химико-фармацевтический журнал, 2004, т.38, 6, 33-35.
4. თ.საღარეიშვილი. ჰიპოგლიკემიური საშუალება *Satureja hortensis*-გან. მეხუთე რესპუბლიკური კონფერენცია ქიმიის. მოხსენებათა თეზისები, თბილისი, 28-30 ოქტომბერი, 2004, 68.
5. თ.საღარეიშვილი. მცენარეული წარმოშობის ჰიპოგლიკემიური საშუალება, საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენცია „გამოყენებითი ქიმიის პრობლემები“, 2010, 90-91.
6. Кемертелидзе Э.П., Сагареишвили Т.Г., Сыров В.Н., Хушбактова З.А., Цуцкиრიძე Л.Р., Курашвили Р.Б. Сатурин – эффективное растительное средство при лечении сахарного диабета 2 типа. Медицинские новости Грузии, №2 (203), 2012, 247-252.
7. Хайс И.М., Мацек К. Хроматография на бумаге. Москва, ИЛ, 1962, 851с.
8. Иванов В.Д., Ладыгина Е.Я., Комиссаренко Н.Ф. Аминокислотный состав различных органов калины обыкновенной (*Viburnum opulus* L.). Фармация, 1985, XXXIV, 5, 8-10.

საქართველოში მოზარდი ბალის ქონდრის ფოთლების მშრალ წყლიან ექსტრაქტში ამინომჟავების თვისობრივი და რაოდენობრივი შედგენილობა

ამინომჟავის დასახელება (შემოკლებული აღნიშვნა)	ამინომჟავების შემცველობა	
	ჯამურ ფრაქციაში, %	მშრალ წყლიან ექსტრაქტში, მგ%
პროლინი (Pro)	37.99	76.58
თიროზინი (Tyr)	10.69	21.56
ასპარაგინის მჟავა (Asp)	8.68	17.50
თრეონინი+ალანინი (Thr+Ala)	6.74	13.58
გლუტამინის მჟავა (Glu)	6.63	13.37
ვალინი (Val)	5.87	11.83
ფენილალანინი (Phe)	4.76	9.59
ლიზინი (Lys)	3.65	7.35
სერინი (Ser)	3.47	7.35
გლიცინი (Gly)	3.13	7.00
იზოლევცინი (Ile)	2.88	5.81
არგინინი (Arg)	2.12	4.27
მეთიონინი (Met)	1.35	2.73
ლეიცინი (Leu)	0.90	1.82
ჰისტიდინი (His)	0.38	0.77
ცისტინი (Cys)	0.25	0.49
ჯამი	99.49	201.6

COMPOSITION OF AMINO ACIDS OF LEAVES *SATUREJA HORTENSIS* L GROWN IN GEORGIA

Tamar Sagareishvili, Iia Gvelesiani*, Daredjan Gulbani**, Daredjan Ghughunishvili*
Iovel Kutateladze Institute of Pharmacochemistry of Tbilisi State Medical University

*Georgian Technical University

**Sokhumi State University

SUMMARY

Qualitative and quantitative composition of the amino acids of the plant garden savory grown in Georgia have been studied using high performance liquid chromatography method by as. Is established, that dry aqueous extract of leaves garden savory, the active constituent of the hypoglycemic remedy– saturin, contains 17 amino acids, with high content of proline.

АМИНОКИСЛОТНЫЙ СОСТАВ ЛИСТЬЕВ ПРОИЗРАСТАЮЩЕГО В ГРУЗИИ ЧАБЕРА САДОВОГО (*SATUREJA HORTENSIS* L.)

Т.Г.Сагареишвили, И.О.Гвелесиани*, Д.В.Гулбани**, Д.М.Гугунишвили*
Институт фармакохимии им. И.Г.Кутателадзе Тбилисского Государственного Медицинского Университета

*Грузинский технический университет

**Сухумский государственный университет

РЕЗЮМЕ

Методом высокоэффективной жидкостной хроматографией изучен качественный и количественный состав аминокислот растения чабера садового, произрастающего в Грузии. Установлено, что сухой водный экстракт листьев чабера садового, основного компонента гипогликемического препарата – сатурина, содержит 17 аминокислот, с высоким содержанием пролина.

სათესლე კარტოფილის წარმოება აპრილის შემცველ სუბსტრატზე

ნანა მდივანი, რუსუდან მდივანი, ნიკოლოზ ზარნაძე, ვენედიქტე წერეთელი

ახალგაზრდა მეცნიერთა ცენტრი (კავშირი) იზოტოპები

განხორციელებულია კარტოფილის საერთაშორისო ცენტრის მიერ მოწოდებული კარტოფილის 17 ახალი კლონის ინტენსიური გამრავლება ჩვენს მიერ მოდიფიცირებულ მურაშიგე-სკუგის საკვებ არეზე. შერჩეულია კლონი, რომელიც გამოირჩევა ზრდის ინტენსივობით და ტემპით. დადგენილია მიკროტუბერების მისაღები სუბსტრატის ოპტიმალური შემადგენლობა, რომლის გამოყენებითაც წარმოებული მიკროტუბერები შემოწმებულია ჯიშურ- და ფიტოსანიტარულ სიწმინდეზე და აკმაყოფილებს სტანდარტის მოთხოვნებს.

აგრარული სექტორის ძირითადი დანიშნულებაა ქვეყნის საიმედო მომარაგება უსაფრთხო სურსათით, რაც შესაძლებელია სასოფლო-სამეურნეო წარმოების უწყვეტი ჯაჭვის შექმნით, რომელიც მოიცავს სამ ძირითად რგოლს: 1.სტრატეგიული სასოფლო-სამეურნეო კულტურების, კერძოდ კარტოფილის საწყისი, გასამრავლებელი მასალის (G0, G1, SSE, SE) წარმოება; 2.სამრეწველო დანიშნულების სერტიფიცირებული თესლის წარმოება; 3.ეკოლოგიურად უსაფრთხო სასურსათო პროდუქტის წარმოება. კარტოფილის წარმოების საწყისი არის უმაღლესი ხარისხის საბაზისო, პირველადი გასამრავლებელი მასალა, რომელზედაც დამოკიდებულია სამრეწველო დანიშნულების თესლის რაოდენობა და ხარისხი. თავისთავად ჯანმრთელი, ჯიშურად ერთგვაროვანი თესლი, რაც დღეისათვის სრულიად დეფიციტურია საქართველოში, კარტოფილის ხარისხის და მოცულობის გარანტიაა. ამდენად, აქტუალურია ოპტიმალური საკვები არეების და სუბსტრატების შემუშავება კარტოფილის მიკროკლონალური გამრავლებისა და უვირუსო სათესლე მასალის წარმოებისათვის.

სამუშაოს მიზანია: 1. კარტოფილის ქსოვილის უჯრედიდან *in vitro* მიკროკლონალური გამრავლებით გენეტიკურად ერთგვაროვანი, ვირუსული, ბაქტერიული და სოკოვანი დაავადებებისაგან თავისუფალი კარტოფილის სათესლე მასალის მიღება მერისტემული კულტურის გამოყენების გზით; 2. კარტოფილის საერთაშორისო ცენტრის მიერ მოწოდებული 17 ახალი კლონიდან ინტენსიურად მზარდი ნიმუშის შერჩევა; 3. ტყის მიწის, ტორფის, პერლიტის, მიკრო და მაკროელემენტების ბაზაზე ორიგინალური სუბსტრატის კომპოზიციის შემუშავება; 4. მიღებული მიკროტუბერების ანალიზი ჯიშურ- და ფიტოსანიტარულ სიწმინდეზე.

თავდაპირველად, ლაბორატორიაში ვახდენდით კარტოფილის საერთაშორისო ცენტრიდან (CIP) მიღებული 17 ახალი კლონის (ცხრილი №1) სინჯარის მცენარეების *in vitro* ინტენსიურ გამრავლებას. საკვებად ვიყენებდით ჩვენს მიერ მოდიფიცირებულ მურაშიგე-სკუგის არეს[1]. ცდების შედეგების შესაბამისად დავადგინეთ საკვები არის შემდეგი კომბინაცია: მურაშიგე-სკუგი ვიტამინებით, 1,5მგ/ლ გიბერელინის მჟავა და 0,1მგ/ლ ჰეტეროაუქსინი (indole-3-butiric acid) [2]. აღნიშნულ ჯიშებს მასიურად გამრავლებდით *in vitro* ლაბორატორიაში და მათ ადაპტაციას ვახდენდით სუბსტრატთან ქოთნებში.

აღნიშნული სამუშაო მეტად ფაქიზი შესასრულებელია, ამიტომ საწარმოო მასშტაბით იგი უნდა განხორციელდეს უახლესი ტექნოლოგიების გამოყენებით, საერთაშორისო სტანდარტების შესაბამისი ინფრასტრუქტურით (ლაბორატორია, ორანჟერეა) და მეცნიერთა უშუალო ზედამხედველობის ქვეშ[3]. გამოსაცდელი ახალი კლონებიდან შევარჩიეთ 304405.47, 304351.109 და 303381.30 კლონები, რომელიც გამოირჩევა მწვანე მასისა და ფესვთა სისტემის ზრდის ინტენსივობით და ტემპით.

ორი კვირის ნაზარდი მცენარეები სინჯარებიდან გადაგვქონდა ქოთნებში სპეციალური დაბალანსირებული სუბსტრატის სხვადასხვა ვარიაციებით და ადაპტაციისათვის ვათავსებდით ტენის, ტემპერატურის და განათების ავტომატიზირებული რეჟიმების მქონე ორანჟერეაში. საუკეთესო შედეგი გვაჩვენა სუბსტრატმა შემადგენლობით: 1/3 ტორფი, მიკრო და მაკროელემენტებით, 1/3 პერლიტი, 1/3 ტყისმიწა [4]. ქოთნის მცენარეების სუბსტრატში ვამატებდით გიბერელინის მჟავას, რომელმაც საგრძნობლად განავითარა მცენარის ფესვთა სისტემა და მწვანე მასა [2]. სხვადასხვა ვარიაციებიდან საუკეთესო შედეგი აჩვენა 1მგ გიბერელინის მჟავამ 100გ სუბსტრატში.

ცხრილი 1. კარტოფილის საერთაშორისო ცენტრიდან (CIP) მიღებული ნიმუშების მახასიათებლები

№	მასალა		მშობლები		ფორმა	კულტურა
	კლონის მინიჭებული ნომერი	წარმოშობის ადგილი	დედრი	მამრი		
1	302476.108	CIP	TITIA	392745.7=(92.187)	in vitro	კარტოფილი
2	302498.70	CIP	720139(YAGANA-INIA)	391180.6=(c90.266)	in vitro	კარტოფილი
3	303381.106	CIP	388611.22=(C91.612)	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
4	303381.30	CIP	388611.22=(C91.612)	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
5	304347.6	CIP	392820.1=(C93.154)	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
6	304350.100	CIP	CHIEFTAIN	392820.1=(C93.154)	in vitro	კარტოფილი
7	304351.109	CIP	CHIEFTAIN	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
8	304369.22	CIP	MARIELA	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
9	304371.20	CIP	MONALIZA	92.187	in vitro	კარტოფილი
10	304387.17	CIP	REINHORT	92.187	in vitro	კარტოფილი
11	304387.92	CIP	REINHORT	92.187	in vitro	კარტოფილი
12	304394.56	CIP	SHEPODY	391207.2=(LR93.050)	in vitro	კარტოფილი
13	304405.42	CIP	WA.018	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
14	304405.47	CIP	WA.018	676008=(1-1039)	in vitro	კარტოფილი
15	397006.18	CIP	389468.3=(92.119)	88.052	in vitro	კარტოფილი
16	397077.16	CIP	392025.7=(LR93.221)	392820.1(C93.154)	in vitro	კარტოფილი
17	397077.6	CIP	386768.10=(MARIA TAMBERA)	392820.1=(C93.154)	in vitro	კარტოფილი

მცენარის ინტენსიური გამრავლებისათვის ვიყენებით ნაზარდის დაფესვიანების მეთოდს, რისთვისაც შევარჩიეთ ჰეტეროაუქსინის (ინდოლე-3-ბუტირიცი აციდი) სამუშაო დოზა 3გ/100მლ. ამისათვის მცენარის 20სმ ზომის ნაზარდ ღეროს, სუბსტრატში გადატანის წინ, გადაჭრის ადგილით 1-2 წუთით ვათავსებდით აუქსინის ფაფისებურ წყალხსნარში.

უნდა აღვნიშნოთ, რომ პერლიტი (ე.წ. აგროპერლიტი), რომლის ქიმიური შემადგენლობაა SiO_2 -71,1%, Al_2O_3 -14,1%, Na_2O -4,0%, K_2O -3,7%, Fe_2O_3 -0,8%, CaO -0,4%, MgO -0,1%, MnO_2 -0,1% ბუნებრივი მინერალია, რომელიც 1000⁰-მდე გაცხელებისას, წყლის ინტენსიური გამოყოფის გამო, ფუფუნება, ხდება მაღალფოროვანი და ძალიან კარგი სორბენტი. ამდენად, მორწყვის დროს იგი ინტენსიურად იწოვს წყალს (400-700%), რომელსაც შემდგომ, თანდათანობით გასცემს, რაც იწვევს მორწყვის სიხშირის შემცირებას. ამავე დროს, მაღალი ტემპერატურა ანადგურებს სარეველების თესვებს და ბაქტერიებს, რითაც მცენარე დაცულია დაავადებებისაგან. ამ და სხვა თვისებების გამო პერილტი ფართოდ გამოიყენება სოფლის მეურნეობაში, ძირითადად სასათბურე მეურნეობებში ხელოვნური ნიადაგების შესაქმნელად [5-7]. ამ მიზეზთა გამო, ჩვენ გამოვიყენეთ პერლიტი სუბსტრატის შემადგენლობაში ტორფთან, მიკროელემენტებთან და ტყის მიწასთან ერთად, რომელმაც შთამბეჭდავი შედეგები მოგვცა გიბერელინის მჟავას დამატების შემთხვევაში.

მცენარის ვეგეტაციის პერიოდში ვახდენდით მცენარის დამატებით გამოკვებას $\text{N}_{20}\text{P}_{20}\text{K}_{20}$ სასუქით. ქოთნის მცენარეებში სასუქისა და სტიმულატორების თანაბრად გადასანაწილებლად ვიყენებდით წვეთოვან სარწყავ სისტემას.

ორანჟერეაში წარმოებულ მიკროტუბერებს ვინახავდით კამერა-მაცივარში +2-+4 $^{\circ}\text{C}$ ტემპერატურაზე სამი თვის განმავლობაში. 2013 წლის გაზაფხულზე მიკროტუბერები გადავიტანეთ ღია გრუნტში, 0,5 ჰა სადემონსტრაციო ნაკვეთზე.

სადემონსტრაციო ნაკვეთზე მინდვრულ ინსპექტირებას ვახდენდით სამჯერ, მცენარის განვითარების მთელი ვეგეტაციის პერიოდში: მცენარის 2-3 ფოთლის ასაკში, ყვავილობის პერიოდში და მწვანე მასის მოცილების წინ. მინდვრული აპრობაცია ჩავატარეთ არსებული სტანდარტის მიხედვით, შესაბამისი მეთოდოლოგიის გამოყენებით [8].

ჯიშურ სიწმინდეს გამოწმენდით მცენარის ანატომიური ნიშნებით [9], ხოლო ფიტოსანიტარულ სიწმინდეს შეძლევ დაავადებებზე: მაღალი პათოგენობის ვირუსული დაავადებები, გამოწვეული PVY და

PLRV; საშუალო პათოგენობის ვირუსული დაავადებები, გამოწვეული PVX და PVM; ბაქტერიული შავფეხა; ფიტოფტორა; რგოლური სიდამპლე; მშრალი სიდამპლე; ღეროს ნემატოდა; რიზოქტონიოზი; ბაქტერიული კიბო [10]. მინდვრული ინსპექტირების დასკვნა მოცემულია ცხრილში 2.

ცხრილი 2. შემოწმების შედეგები ჯიშურ და ფიტოსანიტარულ სიწმინდეზე

№	მაჩვენებლები	%	
		სტანდარტით დასაშვები (მაქს.)	ნაკვეთზე არსებული
1	მინდვრული ინსპექტირება		
2	ჯიშური სიწმინდე	100	100
3	მაღალი პათოგენური ვირუსული დაავადებები, გამოწვეული PVY და PLRV	0	0
4	საშუალო პათოგენობის ვირუსული დაავადებები, გამოწვეული PVX და PVM	1,5	0
5	ბაქტერიული შავფეხა	0	0
6	ჯიშური მინარევი	0	0
7	რგოლური სიდამპლე	0	0
8	Phytoftorainfestans	0,5	0
9	მშრალი სიდამპლე	0	0
10	ღეროსნემატოდა	0	0
11	რიზოქტონიოზი	0	0
12	ბაქტერიული კიბო	0	0

კარტოფილის თესლწარმოების ჯაჭვი წარმოადგენს უწყვეტ ციკლს უმაღლესი ხარისხის (საწყისი გასამრავლებელი) სათესლე მასალიდან სამრეწველო დანიშნულების თესლის წარმოებამდე. აღნიშნული ჯაჭვი მოიცავს რამოდენიმე გენერაციის (თაობის) ერთიან საწარმოო ციკლს ლაბორატორიიდან სათბურამდე და ღია გრუნტის საფეხურამდე; ლაბორატორიის სტადიაზე კარტოფილის სინჯარის მცენარეები ინტენსიურად მრავლდება და იზრდება *ინ ვიტრო* პირობებში, ორანჟერეის სტადიაზე *in vitro* გამრავლებული სინჯარის მცენარეებიდან მიიღება მიკროტუბერები, ღია გრუნტის სტადიაზე კი, მიკროტუბერებიდან ფორმირდება სუპერ სუპერ ელიტური თესლი, შემდეგი მინდვრის თაობა იძლევა სუპერ ელიტურ თესლს და საბოლოოდ – კარტოფილის ელიტურ თესლს. ეს უკანასკნელი, კი, წარმოადგენს კომერციული დანიშნულების თესლს [11,12].

ნაშრომში მოცემული შედეგებიდან ჩანს, რომ ჩვენს მიერ ფიტოპორმონებით მოდიფიცირებული საკვები არის და ორიგინალური სუბსტრატის გამოყენებით წარმატებით განხორციელდა კარტოფილის სუპერ სუპერ ელიტური თესლის მიღება.

სამუშაო შესრულებულია შოთა რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის ხელშეწყობით (გრანტი №10/07)

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. რ. მღვიანი, ნ.ზარნაძე, ვ.წერეთელი. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე,ქიმიის სერია, 38, №4, 325-327.
2. რ. მღვიანი, ნ.ზარნაძე, ვ.წერეთელი. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე,ქიმიის სერია, 2012, 38, №2-3, 234-243.
3. Романов Г.А. Гормональная регуляция клубнеобразования у картофеля. Физиология растений, 2012, 59, №4, 491-498.
4. Кокошкова М.К. Способ выращивания посадочного материала картофеля на торфоопилочном субстрате. Патент Российской Федерации, RU 2187222,2001.
5. აგრო პერლიტი. www.geoperlite.ge.

6. Зыбинова Е.М. Незаменимый перлит. www.miniviolets.ru.
7. Гидропоникаб субстраты. www.vashad.ua.
8. ГОСТ 29268-91
9. საქართველოს კანონი სასოფლო-სამეურნეო კულტურების ვიშების გასავრცელებლად დაშვების, ხარისხიანი თესლისა და სარგავი მასალის შესახებ. 25.06.1999, №2195-III.
10. Аграрное обозрение, 2012, №5(33).
11. Федоренко А. Картофель. Современные методы интенсивного выращивания. Москва: ООО «Центральный Книжный Двор», 2002, 160 с.
12. Шморгунов Г.Т., Тулинов А.Г., Пузанова И.Е. Рекомендации по селекции и семеноводству картофеля. Российская Академия СХН. Сыктывкар, 2012. УДК 635.21:631.81.002.

PRODUCTION OF SEED POTATO ON THE PERLITE-BASED SUBSTRATE

Nana Mdivani, Rusudan Mdivani, Nikoloz Zarnadze, Venedikte Tsereteli

The Center of Young Scientists Isotope

SUMMARY

17 new clones of potato, received from International Potato Center, have been multiplied *in vitro* on the M&S based modified media. 3 clones have been selected, which differ with high growing intensity and speed. Composition of substrate for micro tubers' production has been defended. Micro tubers, produced on developed substrate, have been tested on variety and phyto-sanitarian purity and meet all requirements of the standard.

ПРОИЗВОДСТВО СЕМЕННОГО КАРТОФЕЛЯ НА ПЕРЛИТ-СОДЕРЖАЩЕМ СУБСТРАТЕ

Н.М.Мдивани, Р.В.Мдивани, Н.К.Зарнадзе, В.С.Церетели

Центр (союз) Молодых Ученых «Изотоп»

РЕЗЮМЕ

Осуществлено *in vitro* интенсивное размножение 17-ти новых клонов картофеля, полученных из Международного центра картофеля, на модифицированных средах Мурашиге и Скуга. Подобраны клоны, отличившиеся высоким темпом и интенсивностью роста. Определен оптимальный состав субстрата для производства микроклубней. Микроклубни, полученные на новом субстрате, протестированы на сортовую и фитосанитарную чистоту и удовлетворяют требованиям стандарта.

კილა-კუპრას ფსევდოვულკანური ტალახების ქიმიური და ფიზიკურ-ქიმიური მახრეწებები

ნანა ბოკუჩავა, დავით ჯინჯარაძე, ბელა გოგიჩაიშვილი

*საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი,
აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი*

პირველად განხორციელდა აღმოსავლეთი, დასავლეთი და ცენტრალური კილა-კუპრას ფსევდოვულკანური ტალახების ქიმიური და ფიზიკურ-ქიმიური შესწავლა. განსაკუთრებული ყურადღება დაეთმო ტალახში ორგანული კომპონენტების შემცველობის განსაზღვრას. დადგენილია, რომ აღნიშნული საბადოების ფსევდოვულკანური ტალახები შეიძლება მივაკუთვნოთ სამკურნალო ტალახების რიგს.

ბუნებრივი მინერალურ-ორგანული კოლოიდური წარმონაქმნი - სამკურნალო ტალახი (პელოიდი) ფართოდ გამოიყენება სამედიცინო, ბალნეოლოგიურ და კოსმეტიკურ სფეროში.

მსოფლიოს მრავალ ქვეყანაში პელოიდების შესწავლისადმი ინტერესი საკმაოდ დიდია, რაც გარკვეულწილად აიხსნება საზოგადოების მკვეთრი შემობრუნებით ეკოლოგიურად სუფთა, ბუნებრივი წარმოშობის პროდუქტების მოხმარებისადმი.

პელოიდისათვის სამკურნალო ფუნქციების მინიჭებისადმი მიდგომა მკვლევართა აზრით უნდა განსხვავდებოდეს სხვა ბუნებრივი ნედლეულის შეფასების მეთოდებისაგან, რაც განპირობებულია სამკურნალო ტალახის მინერალურ-ორგანული შედგენილობით. დღეისათვის მიმდინარეობს ამ მიდგომის ჩამოყალიბება და ნებისმიერი ნაშრომი ამ მიმართულებით, ჩვენი აზრით, ხელს შეუწყობს პელოიდების გამოყენების გაფართოებას სამედიცინო, კოსმეტიკურ და საკურორტო-სანატორიული მომსახურების სფეროში [1-7].

ამ თვალსაზრისით მნიშვნელოვანი ყურადღება ექცევა სამკურნალო ტალახებს შორის ფსევდოვულკანურ ტალახებს.

საქართველოს ფსევდოვულკანური ტალახების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებებისა და შედგენილობის შესწავლა, მათი თავისებურებების დადგენა და მიზნობრივი ექსპლუატაცია ჩვენი ქვეყნის წიაღისეული სიმდიდრის რაციონალური გამოყენების ერთ-ერთი აქტუალური საკითხია.

საქართველოში არსებულ სამკურნალო ტალახების 30-მდე საბადოდან მნიშვნელოვანი ნაწილი სწორედ ფსევდოვულკანური ტალახებია, მათ შორის - აღმოსავლეთი, დასავლეთი და ცენტრალური კილა-კუპრას საბადოები, განლაგებული კახეთის რეგიონში, ქვეყნის სამხრეთ-აღმოსავლეთ ნაწილში.

აღმოსავლეთი კილა-კუპრას ტალახის ვულკანი წარმოადგენს 20-22 მეტრი სიმაღლის, საკმაოდ დიდ, ელიფსოიდური ფუძის მქონე წაკვეთილი კონუსის ფორმის ბორცვს. მის მწვერვალზე განლაგებულია 40-მდე გრიფონი, რომელთა უმეტესობა ჩამქრალია. რვა მოქმედი გრიფონი გამოყოფს თხევად ტალახს და მცირე რაოდენობით აირს.

დასავლეთი კილა-კუპრას ტალახის ვულკანი მოიცავს 13 ბორცვს, გრიფონებსა და საღზებს. ტალახის ვულკანის მთელი ზედაპირი მოფენილია დიდი რაოდენობით "ბორცვული ბრეჩქების" სხვადასხვა ქანებიდან ამოყრილი მყარი ნატეხებით. უფრო ხშირად გვხვდება უშუალოდ ტალახის ვულკანების ქვეშ განლაგებული თიხისა და ქვიშა-ქვების ნატეხები.

ცენტრალური კილა-კუპრას ტალახის ვულკანი წარმოადგენს ველს, რომელზეც განლაგებულია 35-მდე მცირე ზომის გრიფონი. აირის აქტიურ გამოყოფას თან ახლავს დამახასიათებელი შიშინი. ბორცვული ბრეჩქების სიმაღლე, მათი მაქსიმალური დაგროვების ადგილებში, არ აღემატება 1-5 მეტრს. უმნიშვნელოა აგრეთვე წყლის დებიტი.

სტრუქტურული თვალსაზრისით კილა-კუპრას ტალახები წარმოადგენს წონასწორობაში მყოფ რთულ ჰეტეროგენულ სისტემას, რომელშიც გაერთიანებულია ურთიერთკავშირში მყოფი ტალახის ხსნარი, კრისტალური ჩონჩხი და კოლოიდური კომპლექსი. ტალახის ხსნარი, რომლითაც გაჯერებულია ტალახის მასა, ხასიათდება სხვადასხვა მინერალიზაციით, იონური და აირადი შედგენილობით, pH სიდიდით. ტალახის ხსნარის საერთო რაოდენობა მერყეობს 48-55% ფარგლებში.

ნაცრიანობა შეადგენს 82-93%, რაც ძირითადად თიხიანი შუა შრეების არსებობით არის განპირობებული. თბოგამტარობა, თბოტევადობა, სითბოშეკავების უნარი მსგავსია.

ცხრილი 4. ტალახების ფიზიკურ-ქიმიური მაჩვენებლები

მაჩვენებელი	საზომი ერთეული	აღმოსავლეთი კილა-კუპრა	ცენტრალური კილა-კუპრა	დასავლეთი კილა-კუპრა
სინესტე	%	55	48	52
მოცულობითი წონა	გ/სმ ³	1,38	1,62	1,43
წებგალობა	დნ/სმ ²	3867	2343	2734
წინააღმდეგობა ძვრადობის მიმართ	დნ/სმ ²	1635	1199	1087
თბოტევადობა	კალ/სმ ² წმ	0,64	0,58	0,62
თბოშეკავების უნარი	ჯმ	270	271	270
თბოგამტარობა	კალ/სმ ² წმ	0,0032	0,0034	0,0033
pH		7,6	7,4	7,3
Eh	mV	- 130	- 145	-140
ნაცრიანობა	%	93	82	86

ტალახის ბალნეოლოგიური თვისებები მნიშვნელოვნად განპირობებულია ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების (ბან) არსებობით, პირველ რიგში ისეთების, როგორცაა მიკროელემენტები, ჰუმინური ნივთიერებები, უმაღლესი ცხიმოვანი მჟავები და სხვა. ამდენად, მნიშვნელოვანი იყო ტალახების შედგენილობისა და ბან შემცველობის შესწავლა.

ცხრილი 5. ტალახებში ელემენტების შემცველობა, %

	აღმოსავლეთი კილა-კუპრა	ცენტრალური კილა-კუპრა	დასავლეთი კილა-კუპრა
Pb	$1,1 \cdot 10^{-3} \div 1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-3} \div 1,4 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$
Sr	$4,7 \cdot 10^{-2} \div 5,5 \cdot 10^{-2}$	$5,6 \cdot 10^{-2} \div 7,7 \cdot 10^{-2}$	$5,0 \cdot 10^{-2}$
Fe	2,8÷3,6	2,4÷2,5	3,1
Mn	$8,0 \cdot 10^{-2}$	$7,9 \cdot 10^{-2}$	$7,5 \cdot 10^{-2}$
Ag	$1,0 \cdot 10^{-4}$	$1,0 \cdot 10^{-4}$	$6,0 \cdot 10^{-5}$
Cr	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$4,8 \cdot 10^{-5}$
Ba	$1,3 \cdot 10^{-1}$	$6,0 \cdot 10^{-2}$	$7,0 \cdot 10^{-2}$
Sn	0	0	0
Co	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$
Ni	$5,6 \cdot 10^{-3}$	$7,0 \cdot 10^{-3}$	$5,6 \cdot 10^{-3}$
Ti	0,21÷0,26	0,17÷0,21	0,18÷0,26
I	$2,12 \cdot 10^{-2}$	$2,53 \cdot 10^{-2}$	$2,51 \cdot 10^{-2}$
Br	$4,43 \cdot 10^{-2}$	$5,22 \cdot 10^{-2}$	$5,73 \cdot 10^{-2}$
Ca	8,16	10,92	9,86
Zn	$7,2 \cdot 10^{-3}$	$5,7 \cdot 10^{-3}$	არ განისაზ.
Rb	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	არ განისაზ.

ტალახის მინერალური ნაწილის განხილვისას მნიშვნელოვანი ყურადღება დაეთმო ელემენტების შესწავლას, რომლებიც მნიშვნელოვან გავლენას ახდენენ სამკურნალო ტალახის ბუნებაზე.

ცხრ.5-ში წარმოდგენილია სპექტრული და რენტგენოფლუორესცენტული ანალიზის მეთოდებით მიღებული იმ მაკრო- და მიკროელემენტების შემცველობა, რომელთა უმრავლესობის ბალნეოლოგიური მოქმედება დადასტურებულია.

მაკრო- და მიკროელემენტების შედგენილობის შესწავლის შედეგად, საბადოებს შორის გამოვლინდა შესამჩნევი მსგავსება ელემენტების კომპონენტურ შედგენილობასა და მათ რაოდენობრივ განაწილებაში. ბიოლოგიურად აქტიურ ელემენტთაგან აღმოჩენილია რკინა, კობალტი, იოდი, ბრომი, თუთია, სპილენძი. დადგინდა, რომ აღნიშნული საბადოებისთვის დამახასიათებელია ბიოლოგიურად აქტიური ელემენტების ერთნაირი შედგენილობა და შემცველობა.

სამკურნალო ტალახების მოქმედების მექანიზმში, ორგანულ ნივთიერებათა უდიდესი როლის გათვალისწინებით, აუცილებელი იყო შეგვესწავლა ორგანული კომპონენტების ძირითადი ჯგუფური შედგენილობა. განსაკუთრებით საინტერესოა ინფორმაცია ტალახებში ყველაზე უფრო გავრცელებულ ტოქსიკური ნივთიერებების არსებობისა და წარმოშობის შესახებ. მათი შემცველობა გამოყენებულ ბუნებრივ ობიექტებში ლიმიტირებულია ზღვრული დასაშვები კონცენტრაციების (ზდკ) ნორმებით.

ფსევდოუკანური ტალახების ორგანული ნაწილის ძირითად მასას შეადგენს ჰუმინური ნივთიერებები, ნავთობიანი კომპონენტები და მჟავა ბუნების ნაერთები (ცხრ.6).

ცხრილი 6. ძირითადი ორგანული კომპონენტების ჯგუფური შემცველობა, %

საკვლევი ნიმუში	ნავთობიანი კომპონენტები (ნახშირწყალბადები, ფისები, ასფალტები)	ჰუმინური ნივთიერებები	ორგანული მჟავები
აღმოსავლეთი კილა-კუპრა	5,5	35	16
ცენტრალური კილა-კუპრა	20	44	25
დასავლეთი კილა-კუპრა	16	32	26

შესწავლილი ტალახებისათვის დამახასიათებელია ნავთობიანი კომპონენტების მნიშვნელოვანი რაოდენობით არსებობა, რომელთა შედგენილობაშია ნახშირწყალბადები, ნეიტრალური და მჟავა ფისები, ასფალტენები.

ცენტრალური კილა-კუპრას საბადოს ტალახის შედგენილობაში ჭარბობს ბიოლოგიურად აქტიური ჰუმინური ნივთიერებები (44%), რომლებიც ხასიათდება მძლავრი აბსორბციული მოქმედებით.

ცხრ.6-ში მოყვანილია ორგანული მჟავების საერთო რაოდენობის განსაზღვრის შედეგები პოტენციომეტრიული მეთოდით. მიღებული მონაცემების ინტერპრეტაციით შეიძლება შემდეგი დასკვნის გამოტანა, რომ ტალახში შემავალ ორგანულ ნივთიერებათა საერთო რაოდენობაში მნიშვნელოვანია ორგანული მჟავების წილი (16-26%), რაც შეესაბამება ცნობილ ფაქტს იმის თაობაზე, რომ მომატებული კონცენტრაციები დამახასიათებელია ნავთობიანი ჰორიზონტების მიწისქვეშა წყლებისათვის [9].

სამკურნალო ტალახების შედგენილობაში შემავალი პოლიციკლური არომატული ნახშირწყალბადები (პან) მიეკუთვნება ყველაზე საშიშ ნივთიერებათა რიცხვს, რომელთა უმრავლესობა ხასიათდება მაღალი ტოქსიკურობითა და კანცეროგენულობით. ამდენად, ამ კლასის ნაერთების შემცველობის შესწავლა წარმოადგენდა განსაკუთრებულ ინტერესს.

პან ანალიზი ჩატარდა მაღალეფექტური სითხური ქრომატოგრაფიის მეთოდით, "Janaco"-ს ფირმის ხელსაწყოთი. კვლევა ულტრაიისფერ დიაპაზონში ($\lambda=254\text{მმ}$) დუბლირებულ იქნა ლუმინესცენტური ($\lambda_{\text{გზ}}=267\text{მმ}$, $\lambda_{\text{ლუმ}}=408\text{მმ}$) დეტექტორების გამოყენებით, რამაც შედეგების დამაჯერებლობის ხარისხის გაზრდის საშუალება მოგვცა. კვლევის შედეგად მიღებულ იქნა ინფორმაცია ნიმუშების თვისებითი და რაოდენობითი შედგენილობის შესახებ.

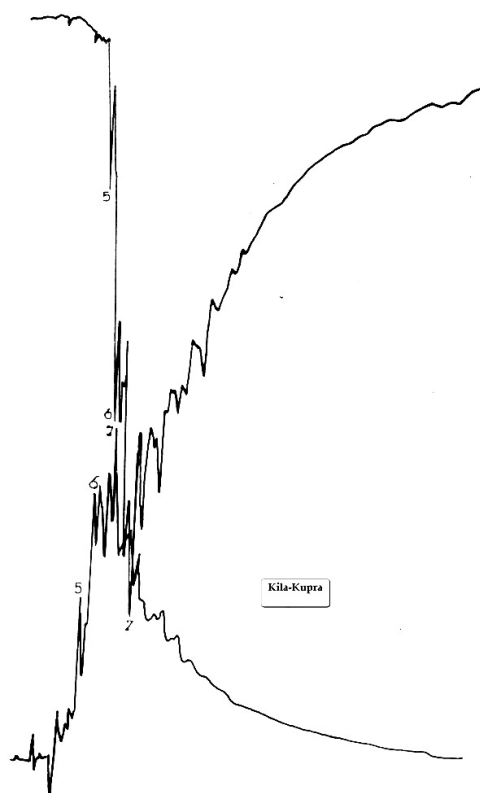
საკვლევი ტალახების ქრომატოგრამებზე აღმოჩენილ იქნა უცნობი წარმოშობის არომატული ნაერთების 18-25 პიკი, რომელთაგან მხოლოდ ზოგიერთის იდენტიფიცირება ვერ მოხერხდა.

აღსანიშნავია აღმოსავლეთი კილა-კუპრას საბადოს ტალახებში პან მნიშვნელოვანი სიჭარბე, როგორც განსხვავებულ ნაერთთა რაოდენობით, ასევე მათი მაღალი კონცენტრაციებით (ცხრ.7, ნახ.1).

ცხრილი 7. პან რაოდენობითი შემცველობა კილა-კუპრას ტალახებში

პან	შეკავების დრო Rt, (წმ) უი-სპექტრი	დასტური ლუმ- დეტექტორით	შემცველობა მკ/გ მშრალ ტალახში
ნაფტალინი	381 - 416	+	0,30 - 1,60
აცენაფტენი, ფლუორენი	445 - 455	-	0,27 - 0,70
ფენანტრენი	513	+	0,10
დმბა* + ფლუორანტრენი	597 - 603	+	0,30 - 0,40
პირენი	670 - 680	+	0,30 - 0,80
ქრიზენი	838 - 845	+	0,30 - 1,60
3,4 ბენზპირენი	1280 - 1422	-	0,10 - 0,53

*დიმთილბენზანტრაცენი



პირენი, რომელიც რაოდენობრივად სჭარბობს სხვა პან-ს [8], ხშირად გვხვდება მრავალ ბუნებრივ გარემოში (წყალი, ფსკერის ნალექები და სხვა) რომელიც არ ემორჩილება ანტროპოგენულ ზემოქმედებას. ტალახებში მათი არსებობა დამატებით ადასტურებს ბიოგენური გზით მათი წარმოქმნის შესაძლებლობას.

ნახ. 1. აღმოსავლეთი კილა-კუპრას ტალახში პან ქრომატოგრამა

ამრიგად, პირველად კილა-კუპრას საბადოების ფსევდოვულკანური ტალახების დეტალურად ჩატარებულმა ქიმიურმა და ფიზიკურ-ქიმიურმა შესწავლამ გვიჩვენა, რომ ისინი, აღმოსავლეთ საქართველოს ვულკანური ტალახების სხვა საბადოების მსგავსად, შესაძლოა მივიჩნიოთ სამკურნალო ტალახების პოტენციურ წყაროდ.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Нана Бокучава, Лечебные грязи Грузии, "Технический Университет", 2009, 150 стр.
2. <http://domkurorta.ru/gryazi.html?start=10/Физико-химические особенности пелоидов/2009>
3. [http://16385.ua.all-biz.info/Славянская клиника/Косметика "Целебные грязи Сакского Озера"/2008](http://16385.ua.all-biz.info/Славянская клиника/Косметика)
4. <http://tamansky.ru/start.php/Лечебные грязи/2010>
5. <http://azovinfo.in.ua/21-lechebnye-gryazi.html/Лечебные грязи/2010>
6. <http://www.medeffect.ru/so/mudtreat.shtml/Лечебные грязи/2010>
7. <http://www.vashkurort.ru/dic/52/Грязи лечебные или пелоиды/2008>.
8. Алексеева Т.А., Теплицкая Т.А. Спектрофотометрические методы анализа ароматических углеводов в природных и техногенных средах. Л. Гидрометеоиздат, 1981, 215 стр.

CHEMICAL AND PHYSICO-CHEMICAL PARAMETERS OF KILA-KUPRA PSEUDO-VOLCANIC MUDS

Nana Bokuchava, David Jincharadze, Bela Gogichaishvili
Georgian Technical University, Akaki Tsereteli State University

SUMMARY

The study of chemical and physico-chemical parameters of East, West, and Central Kila-Kupra pseudo-volcanic muds performed for the first time. Most attention paid on organic content in muds. Stated, that Kila-Kupra pseudo-volcanic muds can be labeled as curative muds.

ХИМИЧЕСКИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПСЕВДОВУЛКАНИЧЕСКОЙ ГРЯЗИ КИЛА-КУПРА

Н.В.Бокучава, Д.Г.Джинчарадзе, Б.А.Гогичаишвили
Грузинский Технический Университет, Государственный Университет им. А.Церетели

РЕЗЮМЕ

Впервые изучены химические и физико-химические показатели псевдовулканической грязи восточная, западная и центральная Кила-Купра. Особое внимание уделено определению органических компонентов. Установлена принадлежность псевдовулканической грязи Кила-Купра к лечебным грязям.

ზაფრანაში კადმიუმის დაბროვების და ბანაწილების შესწავლა

ოლია რჩეულიშვილი***, ალექსანდრე რჩეულიშვილი*, ნინო რჩეულიშვილი*, მარიამ ოსეფაშვილი*,
დიმიტრი პაპუკაშვილი*, ლელა ტულუში*, ნუნუ მეტრეველი**

*ივანე ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი,

**ილიას სახელმწიფო უნივერსიტეტი

შესწავლილ იქნა ზაფრანის და მისი კომპონენტების (ფესვი, ფოთოლი, ყვავილი და ა. შ.) კადმიუმის აკუმულაციის უნარი ზრდის პროცესში, როცა ნიადაგში შეტანილია კადმიუმი. ნაჩვენებია, რომ ზაფრანის ზრდის პროცესში კადმიუმი ძირითადად გროვდება ფესვებსა და ფოთლებში. დაგროვების ეფექტურობის თვალსაზრისით განაწილებას აქვს შემდეგი ხასიათი: ფესვებში გროვდება მეტი, ვიდრე ფოთლებში და ფოთლებში მეტი, ვიდრე ყვავილში.

მცენარეების მიერ მეტალების აკუმულაციის უნარი ფართოდ გამოიყენება ფიტორემედიაციაში. გროკულტურების მიერ მეტალთა აღსორბცია უჯრედთა ისეთ ფუნქციონალურ ჯგუფებთანაა დაკავშირებული, როგორცაა ბუნებრივი პროტეინები, ლიპიდები, კარბოჰიდრატები. ტოქსიკური ელემენტის, კადმიუმის ურთიერთქმედება მცენარეთა სხვადასხვა სახეობებთან იწვევს ფიზიოლოგიური და ბიოქიმიური პროცესების ცვლილებას მცენარეებში [1]. Cd^{2+} მაღალი კონცენტრაციისას აზიანებს ცილებს *in vitro* [2]. სამუშაოში [3] ნაჩვენებია იქნა, რომ კადმიუმის ტრანსპორტი მცენარის ფესვებიდან მის სხვადასხვა ნაწილებში გენეტიკურად რეგულირებადი პროცესია, რომელიც ნაკლებადაა დამოკიდებული გარეშე ფაქტორებზე.

საკვები მცენარე ზაფრანა (*Crocus sativus L.*), ძვირადღირებული სახეობაა, რომელიც ფართოდ გამოიყენება საკვებად და ფიტოტერაპიაში, როგორც მარომატიზირებელი მცენარე [4-8]. ზაფრანა სასარგებლოა ალკაჰოლის [9], მკერდის სიმსივნის [10] და ალერგიული [11] დაავადებისას. საქართველოში ზაფრანის 5 სახეობაა გავრცელებული. *Crocus sativus* იყენებენ სუნელ-სანელებლად. მისი წითელი დინგები შეიცავს ძვირფას საღებავს – კროცინს. ზაფრანაში მეტალთა იონების შემცველობა და მის მიერ მეტალთა აბსორბციისა და აკუმულაციის უნარი თითქმის არ არის შესწავლილი, თუ არ ჩავთლით რამოდენიმე შრომას, სადაც ძირითადი ელემენტებია განსაზღვრული [12-14].

მოცემული სამუშაოს მიზანს წარმოადგენს კადმიუმის აკუმულაციის პროცესის შესწავლა ზაფრანისა და მისი ცალკეული ორგანოების (ფესვები, ღეროები, ფოთლები, ყვავილი) მიერ, როდესაც ეს მცენარე გაზრდილია ნიადაგში, სადაც წინასწარ იქნა შეტანილი კადმიუმი ქლორიდი სახით.

ობიექტი და კვლევის მეთოდები

კვლევის ობიექტად აღებული იქნა საკვები მცენარე ზაფრანა (saffron) და მძიმე მეტალი კადმიუმი (Cd). Cd შევიტანეთ ერთჯერადად ნიადაგში $CdCl_2$ მარილის სახით – 1.5 გ Cd 15 ლიტრი მოცულობის ნიადაგში, რომელიც მოთავსებული იყო სპეციალურ კონტეინერში. მოვასწავინეთ ნიადაგის ჰომოგენიზაცია. ნიადაგიანი კონტეინერი მოვათავსეთ ლაბორატორიულ პირობებში და დავთესეთ მცენარე. ნიადაგი ირწყვებოდა პერიოდულად. გაზრდილ მცენარეს ვიღებდით ნიადაგიდან 30 დღიანი ინტერვალით. ამოღებულ მცენარეებს ვრეცხავდით დისტილირებული წყლით და ვახდენდით მათ დანაწევრებას ცალკეულ ორგანოებად (ფოთოლი, ღერო და ა. შ.). მიღებულ ნიმუშებს ვაშრობდით, მექანიკური საფქვავის საშუალებით ვახდენდით ნიმუშების დაქუცმაცებას, ვწონდით და ვათავსებდით სინჯარებში. სინჯარებში ვამატებდით კონცენტრირებულ აზოტმჟავას და ვაცხელებდით ჰომოგენური ხსნარის მიღებამდე. ჰომოგენიზირებულ ნიმუშებს ვაზავედით ბიდისტილატით 10 მლ მოცულობამდე. კადმიუმის შემცველობის ანალიზი განხორციელდა ატომურ-აბსორბციული სპექტრომეტრის "Analyst-900" გამოყენებით.

შედეგები და მათი განხილვა

ცხრილში 1 ნაჩვენებია ზაფრანაში კადმიუმის შემცველობა დათესვიდან გარკვეული დროის შემდეგ როგორც მთლიანად ზაფრანაში, ასევე მის კომპონენტებში – ფესვებში, ღეროში, ფოთლებში, ყვავილში.

ცხრილი 1. ზაფრანაში და მის კომპონენტებში კადმიუმის შემცველობა (მკგ/გ) დათესვიდან გარკვეული დროის შემდეგ (დღე)

დათესვიდან გასული დრო (დღე)	36	62	92	123	148	160	197
ფესვები	185	159	74	36	84.6	-	115.8
ღეროები	42.6	51.4	15.4	19.7	39.9	10.6	12.3
ფოთლები	88.1	108	102	53.7	56.8	52.4	61
ყვავილი	-	-	-	-	-	11.2	16.8
მთლიანი მცენარე	93.0	125	58.3	94	53.2	31.9	21.1

როგორც ცხრილიდან 1 ჩანს, 36-ე დღეს მთლიანად მცენარეში Cd-ის შემცველობა 93.0 მკგ/გ-ია, ხოლო ამ დროისათვის ყველაზე მეტი ეფექტურობით გამოირჩევა ფესვები (185 მკგ/გ), შემდეგ ფოთლები (88.1 მკგ/გ) და კადმიუმის ყველაზე ნაკლები რაოდენობა აღმოჩნდა ღეროებში (42.6 მკგ/გ). დათესვიდან 62-ე დღისათვის მთლიანად მცენარეში კადმიუმის შემცველობა შემცირდა (125 მკგ/გ) და ეს პროცესი ზოგადად შეიმჩნევა მცენარის ზრდის მთელი პროცესის განმავლობაში. კერძოდ, დათესვიდან გასული დროის ზრდისას, მცირდება მცენარის მიერ ზრდის პროცესში აკუმულირებული კადმიუმის შემცველობა. დათესვიდან 62-ე დღისათვის დაგროვების ტენდენცია იგივეა. უკვე 92-ე დღეს ფოთლებში კადმიუმის აკუმულაციამ გადააჭარბა ფესვებში მისი დაგროვების მაჩვენებელს, რაც შეინიშნება აგრეთვე დათესვიდან 123-ე დღესაც. 148-ე დღის მიხედვით კადმიუმის განაწილება შემდეგნაირი ხდება: ფესვები > ფოთლები > ღეროები, ე.ი. აღნიშნული დამოკიდებულება ანალოგიურია 36-ე და 62-ე დღის, თუმცა აღნიშნულ ორგანოებში კადმიუმის შემცველობებს შორის ნაკლები განსხვავება არის დათესვიდან 160-ე დღისათვის, როცა უკვე კადმიუმის შემცველობის განსაზღვრა შესაძლებელია ყვავილშიც, დაგროვების ყველაზე მეტი ტენდენცია შეინიშნება კვლავ ფოთლებში, შემდეგ ყვავილსა და ღეროებში. კადმიუმის დაგროვების და განაწილების ეს ტენდენცია შენარჩუნებულია დათესვიდან 197-ე დღისთვისაც. მიღებული შედეგები თანხვდება ლიტერატურულ მონაცემებს, რომლის მიხედვითაც მძიმე მეტალების აკუმულაცია ძირითადად ხორციელდება ფესვების სისტემის მეშვეობით. მეტალთა ტრანსპორტი საკმაოდ სწრაფი პროცესია. ნაშრომში [15] *Allium sativum*-ზე ჩატარებულმა ცდებმა აჩვენა, რომ 6 საათის შემდეგ კადმიუმის შემცველობა გაიზარდა ფესვებში და 12 საათის შემდეგ ფოთლებში.

ამრიგად, მიღებული შედეგების ანალიზის საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ ზაფრანის ზრდის მთელი დროის განმავლობაში, ზრდის ყველა ეტაპზე კადმიუმის ყველაზე ნაკლები რაოდენობის აკუმულაცია ხდება ღეროებში, ხოლო ფოთლებში, დათესვიდან 92-ე დღის მონაცემებით შეინიშნება კადმიუმის რაოდენობის ზრდა, შემდგომში ფოთლების მიერ კადმიუმის აკუმულაცია მცირდება და ზრდის შემდგომ პროცესში მისი შემცველობა სტატისტიკური ცდომილების ფარგლებში უმნიშვნელოდ განსხვავდება ერთმანეთისაგან.

სამუშაო შესრულებული იქნა გრანტის
GNSF/STCU 5635 ფარგლებში.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. L.Sanita di Toppi, R.Gabbrielli. Exp. Bot., 1999, v. 41, p. 105-130.
2. J.Keyhani, E.Keyhani, N.Einollahi et al., Biochi. Biophys. Acta, 2003, v. 1621, p. 140-148.
3. H.Obata, M.Umebayashi. J. Plant Nutr., 1997, v. 20, No 1, p. 97-105.
4. S.C.Nair, B.Panikkar, K.R.Panikkar. Cancer Lett., 1991, v. 57, p. 109-114.
5. J.V.Bhat, R.Broker. Nature, 1953, v. 172, p. 544.
6. S.C.Nair, S.K.Kurumboor, J.H.Hasegawa. Cancer Biother., 1995, v. 10, p. 257-264.
7. D.Basker, M.Negri. Econ. Bot., 1983, v.37, p. 228-236.
8. P.A.Tarantilis, H.Morgani, M.Polissiou, M.Manfait. Anticancer Res., 1994, v. 14, p. 1913-1918.
9. S.Akhondzadeh, M.S.Sabet, M.H.Harirchian et al. J. Clin. Pharm. Ther., 2010, v. 35, p. 581-588.
10. M.H.Boskabady, E.Ghasenzadeh, M.Rahbardar et al. Pharmazie, 2010, v. 65, p. 300-305.
11. D/Chryssanthi, G.Dedes, P.G.Karamanos et al. Planta Med., 2011, v. 77, p. 146-151.
12. X.J.Xu, J.Q.Liu. Chin. J. Pharm Anal., 2010, v. 30, p. 285-287.
13. Z.Z.Gao, J.Zhang, Y.Z.Liu. Northwest Univ. Nationalities (Nat. Sci.), 2006, v. 27, p. 26-28.
14. Ling Han Jia, Yi Liu 2, Yu-Zhen Li. J. Chin. Pharm. Sci., 2011, v. 20, p. 297-301.
15. H.Zhang, Y.Jiang, Z.He, M.Ma. J. Plant Phys., 2005, v. 162, No 9, p. 977-984.

STUDY OF CADMIUM DISTRIBUTION AND ACCUMULATION IN SAFFRON

O.Rcheulishvili***, A.Rcheulishvili*, H.Rcheulishvili*, M.Osefashvili*, D.Papukashvili*,
L.Tugushi*, N.Metreveli**

**Elefter Andronikashvili Institute of Physics
Of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University
**Ilia State University*

SUMMARY

The effect of cadmium on Saffron and its components in the process of growth has been studied, when Cd was introduced in soil. Accumulation of Cd in general was observed in roots and leaves during the growth of Saffron, arranged in the descending order as follows: root > leaf > flower.

ИЗУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И АККУМУЛЯЦИИ КАДМИЯ ШАФРАНОМ

О.А.Рчеулишвили***, А.Н. Рчеулишвили*, Н.А. Рчеулишвили*, М.Н.Осефашвили*,
Д.М.Папукашвили*, Л.С.Тугуши*, Н.О.Метревели**

**Институт физики им. Э.Л.Андроникашвили
Тбилисского государственного университета им. И.Джавахишвили,
**Государственный Университет Ильи*

РЕЗЮМЕ

Изучена способность аккумуляции кадмия шафраном и его органами (корни, листья, цветы и др.) в динамике роста, при внесении кадмия в почву. Показано, что в динамике роста шафрана ионы кадмия в основном накапливаются в корнях и листьях. По эффективности накопления распределение имеет следующий характер: в корнях больше, чем в листьях, и в листьях больше, чем в цветках.

ХИМИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

МЕСТНЫЕ ГЛИНИСТЫЕ МАТЕРИАЛЫ В КОСМЕТИЧЕСКИХ ПРОДУКТАХ

Д.Г.Джинчарадзе, Н.В.Бокучава, Б.А.Гогичаишвили
*Грузинский Технический Университет,
Государственный Университет им. Акаки Церетели*

С учетом практики использования глинистых материалов в лечебно-профилактических целях, в том числе в составе косметических препаратов, экспериментально изучена возможность применения соответствующего местного сырья и разработаны рецептуры шампуней, зубных паст, кремов-масок, где помимо каолина, бентонита и пелоида используются минеральные воды и лекарственные растения.

Использование глин и пелоидов для лечебно-профилактических целей достаточно широко известно, обосновано и практически распространено. Глинистые материалы издавна применяются и в косметологии. Под глинистыми материалами в этом контексте имеются в виду как традиционные «цветные» глины, так и природные лечебные грязи-пелоиды. В свою очередь, «цветные» глины – это белая глина – каолин, голубая глина – бентонит и имеющиеся в продаже косметические зеленая, розовая, черная глины [1-4].

Ясно, что в соответствии со своим химическим, минералогическим составом и другими физическими и физико-химическими свойствами эти материалы могут выполнять в косметических средствах, вообще в косметологии, определенные функции. Известно, что всякий косметический препарат состоит из основы и активного компонента. Глины и пелоиды, естественно, входят в основу препарата, являются, в первую очередь, структурообразующими компонентами (наполнителями), которые вместе с другими частями основы обеспечивают ее свойства, а именно – способность к растеканию, т.к. хорошо растекающиеся препараты повышают контакт вещества с объектом; вязкость – низкая вязкость благотворно влияет на скорость переноса активного вещества из основы; окклюзивная способность – влияет на гидратацию и набухание кожи; значение рН – определяющее физико-химическое состояние активного вещества и тем самым условия растворимости в носителе – основе. Глины, в этом амплуа, выполняют в композиции такие функции, как стабилизация дисперсной системы, улучшение совместимости с пленкообразующими веществами. Они обуславливают качество косметического продукта, влияют на консистенцию и устойчивость при хранении [5,6].

Поверхность частиц глины в составе косметических изделий дает быстрый косметический эффект очищения, и, кроме того, природная глина обогащает поверхностные слои кожи микроэлементами, входящими в ее состав в виде примесей.

В свете нового термина «космецевтика», суть которого изложена в книге Г. Кутца [7], глины и пелоиды рассматриваются не только как структурообразующие, но и как компоненты, во многом определяющие лечебно-профилактические свойства продукта.

Предметом наших работ была замена в косметических продуктах глинистыми материалами синтетических или редких химических ингредиентов с выполнением моющих, смягчающих, желирующих, структурирующих, пенящих, тонизирующих, лечащих и т.п. функций.

Глины и пелоиды должны были в большей или меньшей степени заменить ПАВ, эмульгаторы, эмоленды, стабилизаторы эмульсий, структурообразующие компоненты, загустители. В то же время они должны придавать косметическим продуктам те лечебно-профилактические свойства, которые проявляются ими при использовании в медицине.

Глины и пелоиды можно применять в медицине и косметологии как отдельное средство, но можно использовать их как компоненты сложной композиции. В наших рецептурах косметических средств они, как правило, «разбавляются» минеральной водой, настоями и экстрактами лекарственных растений, другими природными продуктами.

Приведем ту информацию о глинистых материалах, которая увязана или проявляется в контексте их использования в косметологии и косметических продуктах.

Глина – продукт химического разрушения горных пород, составляющий основу почв, грунтов, осадочных пород. Его основные компоненты – соединения алюминия, кремния, железа, небольшие количества натрия, магния, кальция, калия. Неглинистые включения – слюдяные материалы, хлориты, тонкодисперсный кварц, полевои шпат, цеолиты и органические частицы.

Основную часть глины составляет коллоидальный гидрат кремнезема и глинозема, определяющий ее основные физические свойства.

С точки зрения косметики, кремний, входящий в состав глины, стимулирует рост волос, обмен липидов, образование коллагена и костной ткани, придает эластичность сосудам и положительно воздействует на эпидермис. Алюминий обладает подсушивающими и вяжущими свойствами, марганец дезинфицирует, дезодорирует и подсушивает кожу.

Мы использовали два вида глин – каолин и бентонит. Каолин (белая глина) – минерал из группы алюмосиликатов. Силикат алюминия с небольшой примесью силикатов кальция и магния. Гигроскопичен, обладает высокой пластичностью, адгезивными и абсорбирующими свойствами. Очищает эпидермис, оказывает антисептическое и поверхностно регенерирующее действие, стимулирует защиту организма, насыщает эпидермис минералами; препятствует распространению микробов вследствие свойства поглощать токсины и загрязнения; облегчает клеточную регенерацию, стимулируя обмен. Каолин придает сосудам в верхних слоях кожи гибкость, способствует образованию коллагена, который, в свою очередь, придает коже эластичность. Каолин рекомендуют включать в состав косметических средств, предназначенных для сухой, вялой и чувствительной кожи. Он укрепляет волосы, снижает их ломкость и выпадение. В зубных пастах каолин, заменяя мел, не требует для создания консистенции добавления поверхностноактивных веществ (ПАВ), выполняя абразивные функции, он снимает зубные камни и укрепляет эмаль.

Бентонит (голубая глина) – пористая, коллоидная глина, состоит в основном из минералов группы монтмориллонита. Бентонит обладает высокой адсорбционной способностью, способностью к набуханию и ионному обмену. Для бентонита характерны загущающие, суспендирующие, желирующие свойства. Он активизирует кровообращение и усиливает процесс обмена в клетках кожи. Нетоксичен, устойчив в широком диапазоне pH и температур. Бентонит применяется в эмульсионных кремах и лосьонах, в шампунях. Обеспечивает быстрое удаление избытка кожного сала и отбеливающий эффект. Используется во многих косметических продуктах для придания густоты, эмульгирования масел и суспензий [8].

Пелоиды – природные образования, состоящие из воды, минеральных и органических веществ, имеющие мелкодисперсную структуру, однородность и мазеобразную консистенцию. Оксидный состав кристаллического скелета пелоидов близок к глинам. Сложнейший комплекс биологически активных веществ (БАВ), макро- и микрокомпонентов, содержащихся в пелоидах, интенсифицирует микроциркуляцию крови и все обменные процессы в кожных покровах, нормализует работу сальных и потовых желез, способствует устранению микробного дисбаланса, оказывает кератолитическое действие, стимулирует созревание коллагеновых структур, обеспечивает бактерицидные, фунгицидные и противовоспалительные свойства. В косметическом препарате пелоид служит, также, структурообразующим компонентом.

Лечебные грязи различают по генезису, месту образования, химическому и минералогическому составу, специфике лечебно-профилактического действия. В Грузии имеются практически все типы пелоидов, в том числе используемые нами в данном случае сопочные [9]. Отметим еще, что используется разновидность сопочных грязей, так называемые «сухие» грязи, изучению которых посвящена докторская диссертация [10].

В таблице 1 приводится оксидный состав глин и пелоида, которые использовались нами при разработке рецептур косметических средств – шампуней, зубных паст и кремов.

Что касается минералогического состава, то в каолине – это каолинит, в бентоните – монтмориллонит, в сопочной грязи – монтмориллонит и иллит.

Глины и пелоид использовались в виде сухих порошков или гелей (суспензий). До их использования делалась микробиологическая и радиоактивная оценка. Для обеспечения микробиологической безопасности были экспериментально найдены оптимальные условия термической обработки в сушильном шкафу: 15 – минутная выдержка при температуре $(85 \pm 5)^\circ\text{C}$.

Был экспериментально разработан способ приготовления суспензии глин и сухого пелоида. Оптимальная концентрация глиняного геля (суспензии) для стабилизации косметической композиции была установлена с помощью кондуктометрического метода.

По изменениям электропроводности суспензий различной концентрации строится график, где точка перелома соответствует критической концентрации структурообразования. Было найдено, что оптимальная концентрация суспензии глины 15-20%. Поэтому готовится сперва 20%-ная суспензия, а затем в случае надобности (если смесь получается чересчур густой), она разбавляется

до 15%. Процедура приготовления суспензии состоит в том, что берем 100 г глины и добавляем 400 мл теплой воды (в том числе минеральной) разминаем, перемешиваем и ставим в термостат на 3 часа при температуре 80°C, затем к отстоявшемуся раствору добавляем 5 г Na₂CO₃ (на каждые 100 г глины – 5 г соды), ставим на водяную баню, доводим воду до температуры кипения и оставляем на 30 минут.

Таблица 1. Оксидный состав глин и пелоида, %

Оксиды \ Материал	Каолин Джвариса (Ткибульский р-н)	Бентонит Аскана (Озургетский р-н)	Бентонит Зеквада-Сабе (Харагоульский р-н)	Бентонит Кроли (Харагоульский р-н)	Пелоид Ахтала (Гурджаанский р-н)
SiO ₂	64,96	60,34	52,25	91,40	53,10
Al ₂ O ₃	20,74	22,21	16,62	4,51	16,10
Fe ₂ O ₃	4,69	2,04	3,90	0,65	5,70
FeO		0,84			
CaO	1,13	2,72	2,40	0,25	7,00
MgO	0,53	4,87	0,01	0,32	3,20
Na ₂ O		0,24			2,00
K ₂ O	1,48	0,19	0,57	1,68	2,60
H ₂ O	6,44	7,05		0,81	
MnO		0,04			
TiO ₂		0,25			
SO ₃			0,26		1,00

В косметические композиции глина вводится в таком виде с соответствующими количественными расчетами.

В качестве примера разработанных нами рецептур косметических препаратов с использованием глин и пелоида приводятся три состава шампуней, три состава зубной пасты, два состава крема-маски. Образцы всех представленных составов прошли токсико-гигиенические испытания в профильной организации. В полученном заключении говорится, что образцы не оказывают кожераздражающего и резорбционного действия, не меняют функционального состояния человеческой кожи и полости рта. Препараты отвечают и соответствуют гигиеническим нормам, предъявляемым к препаратам данного класса. Образцы в течение долгого времени хранятся в лаборатории без признаков порчи.

Таблица 2. Составы косметических средств с участием каолина, %

Зубная паста		Зубная паста	
Каолин Джвариса	60,1	Каолин Джвариса	46,0
Бензоат натрия	0,3	Глицерин	6,5
Сорбитол	0,6	NaHCO ₃	0,1
Глицерин	9,0	NaCl	1,1
Настойка апельсина	7,5	Мед	1,3
Ванилин	-	Ментол	-
		Краситель	-
Минеральная вода		Спиртовый экстракт туи	1,6
Нуниси	22,5	Масляный экстракт туи	1,6
		Спиртовый экстракт мяты	3,3
		Ванилин	0,1
		Минеральная вода Бииса	39,4

Таблица 3. Составы косметических средств с участием бентонита, %

Шампунь		Шампунь	
Бентонит Аскана	20,4	Бентонит Аскана	18,9
NaHCO ₃	1,1	NaHCO ₃	1,0
Спиртовый экстракт лопуха	1,2	Спиртовый экстракт лопуха	3,8
Капоровый экстракт душицы	0,8	Спиртовой экстракт аира	0,6
Минеральная вода		Масляный экстракт душицы	0,6
Цхалтубо	76,5	Минеральная вода	
		Нуниси	75,7
Зубная паста		Крем-маска	
Бентонит Аскана	55,6	Бентонит Аскана	12,5
Спиртовый раствор шалфея		Ланолин	37,5
Спиртовый раствор мяты	11,1	Масло персиковых косточек	37,5
Спиртовый раствор мелиссы		Витамин Е	10 кап.
Минеральная вода		Минеральная вода	
Боржоми	33,3	Нуниси	12,5

Таблица 4. Составы косметических средств с участием пелоида, %

Шампунь		Крем-маска	
Пелоид Ахтала	31,7	Пелоид Ахтала	46,1
Лаурилсульфат натрия	0,6	Соевое молоко	38,5
Натрий карбоксиметилцеллюлоза	0,5	Пчелиный воск	7,7
Глицерин	1,2	Мед	7,7
Отдушка	0,1		
NaCl	0,6		
NaHCO ₃	0,6		
Настой бессмертника	12,7		
Настой ромашки	12,7		
Этанол	4,4		
Капоровый экстракт душицы	3,2		
Минеральная вода Тбилиси (Лиси)	31,7		

При достаточно традиционном подборе остальных компонентов представленных составов (кроме, нашего know how – соевого молока в креме-маске [11]) заслуживает быть отмеченным и подчеркнутым использование грузинских лечебных минеральных вод. Использованные нами минеральные воды пяти наименований были не только простыми растворителями, но и вносили в композицию прямой лечебно-профилактический потенциал, причем специфический для каждого вида и назначения косметического средства.

В заключение хотелось бы сказать, что результаты работы по проекту «Разработка рецептур и получение образцов лечебно-профилактической косметической продукции на базе природных ресурсов Грузии», отраженные в ряде публикаций [12-20], еще раз подтвердили, что природные ресурсы Грузии, в данном случае, глинистые материалы, минеральные воды, лекарственные растения и другие, позволяют организовать производство конкурентоспособных косметических средств с расчетом на экспорт.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Мария Милаш. Целебная глина и лечебные грязи. Изд-во Сова. Москва. Санкт-Петербург, 2006, 154 с.
2. Мария Полевая. Целебная глина и лечебные грязи. «Весь». Санкт-Петербург, 2004, 86 с.
3. Алевтина Корзунова. Целебная глина и грязи. Москва, «Эксмо», 2004, 125 с.
4. В.Д. Казьмин. Лечение глиной, песком, лечебными грязями. Ростов-на-Дону, «Феникс», 2005, 215 с.
5. Основы косметической химии, под ред. Т.Пучковой, Школа косметических химиков, Москва, 2011, 407 стр.
6. ლ. ბოკუჩავა, ნ. ბოკუჩავა, დ. ჯინჭარაძე, პარფიუმერულ-კოსმეტიკური წარმოების ნედლეული, სტუ, თბილისი, 2007, 231 გვ.

7. Г. Кутц, Косметические кремы и эмульсии, ООО «Фирма Клавель», ИД «Косметика и медицина», Москва, 2004, 267 стр.
8. Ю. Дрибноход, Косметика и косметология, словарь-справочник, ИД «Весь», С-Пб, 2002, 413 стр.
9. Н. Бокучава. Лечебные грязи Грузии. Грузинский технический университет, Тбилиси, 2009, 150 с.
10. ლ. ებანოიძე. საქართველოს ბუნებრივად მშრალი სამკურნალო ტალახების ფიზიკურ-ქიმიური შესწავლა. სადოქტორო დისერტაცია, სტუ, 2012.
11. ნ. ბოკუჩავა, დ. ჯინჯარაძე, ლ. ებანოიძე. სამკურნალო-პროფილაქტიკური კოსმეტიკური კრემი სოიას რძის გამოყენებით. საქართველოს ინტელექტუალური საკუთრების ეროვნული ცენტრი, დეპონირების დამადასტურებელი მოწმობა №4222, 08.2010.
12. Н.В. Бокучава, Д.В. Бибилеишвили, И.Г. Бердзенишвили, Л.О. Эбаноидзе, Цветные глины Грузии в косметике, საქართველოს კერამიკოსთა ასოციაციის მე-2 საერთაშორისო კონფერენცია და გამოფენა, თბილისი, 7-10 ოქტომბერი, 2009, გვ. 122-124
13. ლ. ებანოიძე, ი. მემანიშვილი, ნ. ბოკუჩავა, მ. მიქაია, ნ. სპირანტი, ბუნებრივი ნედლეულის ბაზაზე სამკურნალო-პროფილაქტიკური კოსმეტიკური ნაწარმის (მალამო, ლოსიონი) მიღება, საერთაშორისო სამეცნიერო-პრაქტიკული კონფერენციის "ინოვაციური ტექნოლოგიები და თანამედროვე მასალები" შრომები, ქუთაისი, 2010, გვ. 392-393
14. D. Jincharadze, N. Bokuchava, Development of Cosmetic Compositions containing Kaoline, Bentonite and Peloid First International Conference for Students and Young Scientists on Materials Processing Science, Georgian Technical University, Tbilisi, 11-13 October, 2010. Journal of Georgian Ceramic Society, #2(23) – 2010, 1(24) - 2011, p 156-161
15. Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Л.О. Эбаноидзе, Н.П. Микая, Н.О. Спиранти, Получение и изучение свойств лечебно-профилактического косметического крема-маски, საქართველოს ქიმიური ჟურნალი, ტ.10, №2, 2010, გვ. 224-226.
16. Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Л.О. Эбаноидзе, Лечебно-профилактические зубные пасты на природном сырье, საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2010, ტ.36, №3, გვ. 373-377.
17. Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Л.О. Эбаноидзе, Использование соевых продуктов в составе косметических средств, საქართველოს ქიმიური ჟურნალი, ტ.10, №3, 2010, გვ. 357-360.
18. Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Л.О. Эбаноидзе, Получение косметических шампуней с использованием лечебной грязи и соевого молока, საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2010, ტ.36, №3, გვ. 378-381.
19. И.Г. Бердзенишвили, Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Косметические шампуни на природном сырье, საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2010, ტ.36, №3, გვ. 382-384.
20. Н.В. Бокучава, Д.Г. Джинчарадзе, Л.О. Эбаноидзе, Эмульсионные косметические кремы на природном сырье, საქართველოს ქიმიური ჟურნალი, ტ.11, №3, 2011, გვ. 333-335.

ადგილობრივი თიხოვანი მასალები კოსმეტიკურ პროდუქტებში

დავით ჯინჯარაძე, ნანა ბოკუჩავა, ბელა გოგიჩაიშვილი
 საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი,
 აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რეზიუმე

თიხოვანი მასალების სამკურნალო-პროფილაქტიკური მიზნით, მათ შორის კოსმეტიკური პრეპარატების შედგენილობაში გამოყენების პრაქტიკის გათვალისწინებით, ექსპერიმენტულად შესწავლილია შესაბამისი ადგილობრივი ნედლეულის გამოყენების შესაძლებლობა და დამუშავებულია შამპუნების, კბილის პასტების, კრემ-ნიღბების რეცეპტურები, სადაც კაოლინის, ბენტონიტისა და პელიოდის გარდა გამოყენებულია მინერალური წყლები და სამკურნალო მცენარეები.

LOCAL CLAY MATERIALS IN COSMETICS PRODUCTS

David Jincharadze, Nana Bokuchava, Bela Gogichaishvili
 Georgian Technical University
 Akaki Tsereteli State University

SUMMARY

Counting the practice of appliance of clay materials for curative purposes in cosmetics, experimental research performed to investigate the possibility of use of local raw materials. The receipts of shampoos, tooth pastes, cream-masks containing caoline, bentonite and peloids along with herbs and mineral waters were developed.

α-პინენისა და მისი ნაწარმების სინთეზის შესახებ

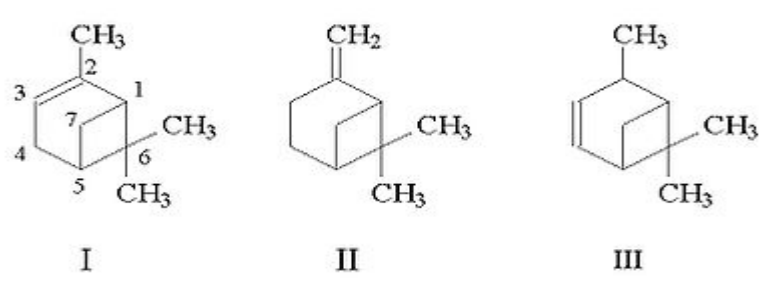
ნინო ნონიკაშვილი, ნინო ქავთარაძე, ირმა მიქაბე, თეიმურაზ უჩანეიშვილი, ავთანდილ დოლიძე
 ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
 პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი

სხვადასხვა დანიშნულების ბიოლოგიურად აქტიური საშუალებების ნომენკლატურაში ბუნებრივი ნედლეულის საფუძველზე მიღებული აქტიური საწყისების მზარდი გამოყენების უზრუნველსაყოფად დაგეგმილია არსებული მცენარეული ნედლეულიდან მარტივი გადაამუშავებით სხვადასხვა ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების გამოყოფა და მათი გამოყენება ეფექტური ნივთიერებების მისაღებად.

სადღეისოდ აქტუალურია მცენარეული ნარჩენებიდან მიღებული ტერპენული ზეთების გამოყენება ბიოლოგიურად აქტიური ბუნებრივი ფრაგმენტების მისაღებად ახალი საშუალებების დასამზადებლად. მნიშვნელოვანია წიწვოვანი მცენარეების გადაამუშავების ანარჩენებიდან ტერპენული ზეთების გამოყოფა და მათი შემდგომი დაცოფა, მოდიფიცირება (მათ შორის ახალი ფუნქციონალური ჯგუფების შეტანით) და უკანასკნელთა საფუძველზე ეკოლოგიურად ნაკლებად სახიფათო სამკურნალო საშუალებების მიღება. გამოყოფილი ფრაგმენტების ურთიერთდაკავშირებით შესაძლებელია მთელი რიგი ახალი ნაერთების დამზადება, სადაც სავარაუდოდ გაერთიანდება ბიოლოგიური აქტივობის სხვადასხვა სახე და ამით მიღებული იქნება ახალი შესაძლებლობები სამკურნალო საშუალებების დასამზადებლად. ამდენად, პრობლემის აქტუალობა განპირობებულია მცენარეული ნედლეულიდან პრაქტიკულად სასარგებლო ნაერთების გამოყოფით, რომელთა შემდგომი მარტივი გადაამუშავებით შესაძლებელია ბუნებრივი წარმოშობის სხვადასხვა საშუალებების მიღება, რომლებიც არ იქნება სახიფათო ადამიანისა და გარემოსათვის.

სიახლეს წარმოადგენს სამედიცინო დანიშნულების ბიოლოგიურად აქტიური ახალი ნაერთების მიღება, ადგილობრივი მცენარეული ანარჩენებიდან გამოყოფილი ტერპენული ზეთებიდან მიღებული აქტიური ბუნებრივი ფრაგმენტების საფუძველზე. ასევე, განიხილება სხვადასხვა აქტიური ფრაგმენტების დაკავშირების საფუძველზე ახალი სამკურნალო დანიშნულების ნაერთების მიღების შესაძლებლობები.

α-პინენი (2,2,6-ტრიმეთილბიციკლო-[3.1.1]-ჰეპტენ-2) ბიციკლური ტერპენია (მონოტერპენი). სახელწოდება წარმოდგება სიტყვა *Pine*-დან, რაც ნაძვს ნიშნავს. პინენები მწერების ქიმიური კომუნიკაციის მნიშვნელოვანი რეგულატორები არიან. ცნობილია პინენის 3 იზომერი, რომლებიც განსხვავდებიან ორმაგი ბმის მდებარეობით [1].



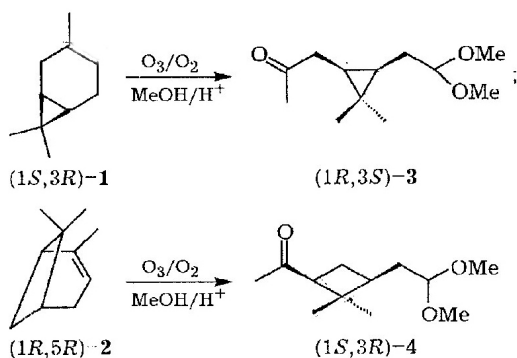
I 2,2,6-ტრიმეთილბიციკლო-[3.1.1]-ჰეპტენ-2 (α-პინენი)
 II 2-მეთილენ-6,6-დიმეთილბიციკლო(3.1.1)ჰეპტან (β-პინენი)
 III 2,6,6-ტრიმეთილბიციკლო(3.1.1)ჰეპტენ-3 (δ-პინენი)

ცხრილში მოცემულია პინენების ფიზიკური და ქიმიური მახასიათებლები:

ნაერთი	T _{ღვ} °C	T _{დღ} °C	d ²⁰	n _d ²⁰	[α] _D ²⁰
α-პინენი	(-75.5)	156.2	0.8582	1.4658	(+52.4)°C
β-პინენი	(-62.2)	164.0	0.8694	1.4762	(-24.0)°C
(±)-δ-პინენი		157-159	0.8636	1.4656	
(-)-δ-პინენი		156-157	0.8590	1.4667	(-6.2)°C

α-პინენი ტერპენული ზეთის - სკიპიდარის ძირითადი შემადგენელი ნაწილია (70-90% მას). მიზანშეწონილია ზეთს მოცილდეს დაბალმდულადი მკვეთრი სუნის მქონე ფრაქცია, რაც გააუმჯობესებს შემდგომი სინთეზის პირობებს. პინენებს ასევე მრავალი მცენარის ეთერზეთები შეიცავენ. α-პინენი მიიღება ზოგიერთი წიწვოვანის, ძირითადად კი ნაძვის მერქნიდან. ტერპენული ზეთის შემადგენლობა განპირობებულია იმ ბოტანიკური სახეობით, საიდანაც იგი არის მიღებული. აღნიშნული ზეთი უფრო ან მოყვითალო ფერის სითხეა, ფიჭვის დამახასიათებელი სუნით. ეს რთული ნარევი კარგად იხსნება ორგანულ გამხსნელებში: დიეთილის ეთერში, აცეტონსა და ეთანოლში, წყალში უხსნადია. იგი წარმოადგენს აქროლად ნივთიერებას და ამასთან ერთად მისი კონსინსტენცია ხდება უფრო ბლანტი. ტერპენული ზეთი გამოიყენება ლაქების, საღებავებისა და ემალის გამხსნელად, აგრეთვე ის ძვირფასი ნედლეულია ისეთი პროდუქტების მისაღებად, როგორცაა: კამფარა, ინსექტიციდები, სურნელოვანი ნივთიერებები, პარფიუმერული კომპოზიციები, კოსმეტიკური ნაწარმი და სხვ. [2].

α-პინენის გარდაქმნით სხვადასხვა თვისებების პროდუქტების მიღებაა შესაძლებელი, რომელთა ოზონოლიტური გახლეჩით მიიღება ციკლოუტანის და ციკლოპროპანის ნაწარმები, ოპტიკურად აქტიური ცენტრების განსაზღვრული სტერეოქიმით. მიღებული მოლეკულა შეიცავს დიფერენცირებული რეაქციის უნარის მქონე ჟანგბადმემცველ ფუნქციურ ჯგუფებს.



α-პინენის ნაწარმი 1 გამოიყენება იუვენალური პორმონების სინთეზური ანალოგების მისაღებად. ასევე, კვლავიდან 1 საფუძველზე განხორციელებულია ვაზის ფქვილის მღვიარა (*planococcus citri*) ფერომონის სინთეზი [3]. α-პინენის მჟავას ჰიდრატიციით მიიღება მონოტერპენების, სპირტებისა და ნახშირწყლების ნარევი [4-7]. კომერციული თვალსაზრისით α-ტერპენოლი, 4-ტერპინოლი და ტერპინოლის ჰიდრატი α-პინენის საინტერესო ნაწარმებია: α-ტერპენოლი ავლენს ანტიმიკრობულ აქტივობას და გამოიყენება ჭრილობების და მწერის ნაკენების შესახორცებლად, ხოლო ტერპენული სპირტები ფართოდ გამოიყენება ფარმაცევტულ ინდუსტრიაში. [8-11]

ჩვენს მიერ მიღებული იქნა α-პინენი შემდეგი მეთოდით: სასაქონლო სკიპიდარის გამონდისას შეგროვებულია 150-170°C ფრაქცია, რომელიც შემდეგ დაიყო სარექტიფიკაციო სვეტის საშუალებით (ტდ-154-155°C 760 მმ.ვ.ვ.ს., სკიპიდარის გამოსავალი 40% (მოც.); α-პინენის მოლური ფრაქცია – 44.5910). ჩატარდა მიღებული ფრაქციის ქრომატოგრაფიული ანალიზი α-პინენის შემცველობაზე. დადგინდა, რომ 94% α-პინენია. ბრუნვის კუთხე გაიზომა პოლარომეტრზე +52.2°C, სვედრითი წონა – 0.8575გ/მლ.

მიმდინარეობს სამუშაოები, რომლებშიც გამოყენებული იქნება წიწვოვანი მცენარეების გადამუშავების ანარჩენებიდან გამოყოფილი α-პინენის გარდაქმნით მიღებული პროდუქტების ბლოკ-სინთონები. ყველა მიღებულ პროდუქტს ჩაუტარდება ქრომატო-მასსპექტრომეტრული (GS/MS) ანალიზი ქიმიური იდენტიფიცირებისათვის. მცენარეებიდან გამოყოფილი თითოეული ბლოკ-სინთონი დახასიათდება ფიზიკურ-ქიმიური მაჩვენებლებისა და სისუფთავის მიხედვით. საჭიროების შემთხვევაში მოხდება მრავალჯერადი გასუფთავება.

ახალი ნაერთების სინთეზი განხორციელდება ბუნებაში არსებული ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების სტრუქტურული ფრაგმენტების შეერთებით, რის შედეგადაც მიზნობრივ ნივთიერებებს ექნებათ პოლიფუნქციური თვისებები. შერჩეული საინტერესო სტრუქტურის მქონე მცენარეული წარმოშობის ბიოლოგიურად აქტიური ფრაგმენტები შესაძლებელია გამოყენებული იქნას სხვადასხვა დანიშნულებით და ეს აფართოვებს მიმართული ორგანული სინთეზის ნედლეულის ბაზას როგორც საქართველოში, ასევე სხვა ქვეყნებში. განსაკუთრებით საინტერესოა ის გარემოება, რომ საწყის

ნედლეულად გამოყენებულია ეკოლოგიურად უსაფრთხო და ეკონომიკურად ხელმისაწვდომი მცენარეული ზეთი. სავარაუდოა, რომ ბუნებრივი ბლოკ-სინტონების გამოყენებით მიღებული მთელი რიგი სინთეზური ანალოგები იქნება საფუძველი ახალი სამკურნალო საშუალებების დამზადებისათვის.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

- 1 J.Mann, R.S.Davidson, J.B.Hobbs, D.V.Banthorpe, J.B.Harborne, *Natural Products*, p. 309-311, Addison Wesley Longman Ltd., Harlow, UK, 1994.
- 2 ლ.ტატიაშვილი, ნ.ნონიკაშვილი, ნ.წეროძე, ი.მიქაძე, ნ.ქავთარაძე, ლ.დოლიძე, თ.უჩანეიშვილი, ა.დოლიძე. α -პინენის შემცველი მცენარეული ნედლეულის სხვადასხვა სინთეზისათვის გამოყენების შესაზღვებლობები. პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტის შრომები, 2011, გვ. 64-66.
- 3 О.С.Куковинец, Т.И.Зверева, В.Г.Касрадзе, М.И.Абдуллин, Г.А.Толстикова. Новый подход к синтезу феромонов и ювеноидов с малыми циклами в молекуле. Химия в интересах устойчивого развития, 2008, т. 16, с. 731-734.
- 4 J.Vital, A.M.Ramos, I.F.Silva, H.Valente, J.E.Castanheiro. *Catal. Today*, 2000, v. 56, p. 167–172.
- 5 J.Vital, J., A.M.Ramos, I.F.Silva, H.Valente, J.E.Castanheiro. *Catal. Today*, 2001, v. 67, p. 217–223.
- 6 J.E.Castanheiro, I.M.Foseseca, A.M.Ramos, R.Oliveira, J.Vital. *Catal. Today*, 2005, v. 104, p. 296–304.
- 7 T.Mochida, O.Ryuichiro, H.Naoto, K.Yuichi, O.Toshio. *Microporous Mesoporous Mater.*, 2007, v. 101, p. 176–183.
- 8 S.P.Bhatia. *Food Chem. Toxicol.*, 2008, v. 46, p. 5275–5279.
- 9 L.D.Martino, D.F.Vinzenco, F.Carmen, M.Enrico, S.Felice. *Molecules*, 2009, v. 14, p. 2735–2746.
- 10 M.R.Moreira, G.M.P.Cruz, M.S.Lopes, A.A.C.Albuquerque, J.H.L. Cardoso. *J. Med. Biol. Res.*, 2001, v. 34, p. 1337–1340;
- 11 S.M.Bagheri, S.Amirhossein, R.G.Ahmad, S.Soodabeth, M.Maryam, I.Mehrdad. *Pharm. Biol.*, 2010, v. 48, No 3, p. 242–2463.

ABOUT SYNTHESIS OF α -PINENE AND ITS DERIVATIVES

N.Nonikashvili, N.Kavtaradze, I.Mikadze, T.Uchaneishvili, A.Dolidze
*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
at Iv. Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

Separation of various biologically active compounds from plant raw materials by means of simple processing and their application in obtaining active substances is planned. This will ensure the growing demand of usage of natural substances in the nomenclature of biologically active means of various purposes.

О СИНТЕЗЕ α -ПИНЕНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Н.У.Ноникашвили, Н.А.Кавтарадзе, И.И.Микадзе, Т.Г.Учанеишвили, А.В.Долидзе
*Институт физической и органической химии им. П.Г. Меликишвили
Тбилисского государственного университета им. Ив. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Путём несложной переработки планируется выделение различных биологически активных соединений из растительного сырья и их применение для получения эффективных веществ. Это обеспечит возрастающую потребность использования природных веществ в номенклатуре биологически активных средств различного назначения.

ქიმიური ეკოლოგია

საქართველოში ბაზმარბისებული პესტიციდების მარაგების
ბაზმარბისებულობისა და დაბინძურებული ნიადაგების აღდგენის შესაძლო მეთოდები

ირმა მიქაძე, ნათია ბარბაქაძე, თამარ დგებუაძე, მაია ჯაფარიძე, ქეთევან ქოჩიაშვილი
ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი

მრავალწლიანი არაკონტროლირებადი შენახვის გამო სხვადასხვა ქიმიური შემადგენლობის გაუვარგისე-
ბული პესტიციდების ნარჩენების გადასამუშავებლად შერჩეულია ქიმიური, ბიო- და ფიტორემედიაციის
შესაძლო მეთოდები. დაბინძურებული ნიადაგების რეაბილიტაციისათვის გამოყენებულია წინასწარ
შერჩეული მცენარეები, რაც მისი ხელმეორედ გამოყენების შესაძლებლობას იძლევა.

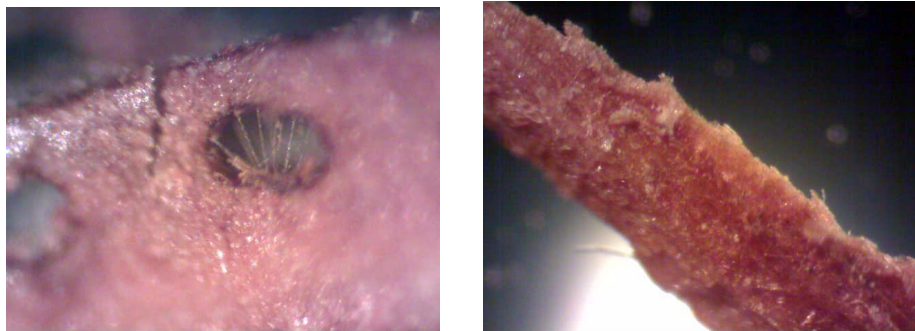
ეკოსისტემაში გამოუსადეგარი პესტიციდების მიწოდების წყაროს წარმოადგენს შხამქიმიკატების
ძველი საწყობები, ნაგავსაყრელები, სასოფლო-სამეურნეო ავიაციის აეროდრომები. როგორც
გამოკვლევებმა აჩვენა, გაუქმებული საწყობების ირგვლივ, ნიადაგში აკრძალული ქლორორგანული
პესტიციდების კონცენტრაცია დასაშვებ ნორმატივებს აღემატება 100-ჯერ. აქედან გამომდინარე,
შხამქიმიკატების საწყობების გარშემო ნიადაგის სანიტარული ზონა წარმოადგენს მდგრადი პესტიცი-
დებით გარემოს დაბინძურების წყაროს და საჭიროებს გასუფთავებას. მსოფლიოში განვითარებად
ქვეყნებში დაგროვილია ასეულ ათასობით ტონა გაუვარგისეებული პესტიციდები. მათ შორის არის
ძლიერმოძწამვლელი და სახიფათო ინსექტიციდები. საკმაოდ დიდია აკრძალული პესტიციდების
რაოდენობაც. მათ რიცხვშია მდგრადი ორგანული დამაბინძურებლებიც (POPs). ჩვენს ქვეყანაში გასუ-
ლი საუკუნის მეორე ნახევრისთვის დაგროვდა გაუვარგისეებული პესტიციდების დიდი რაოდენობა, რაც
გახდა საფუძველი საქართველოში პესტიციდების ცენტრალიზებული სამარხის ორგანიზებისათვის.

გასული საუკუნის შუა წლებიდან პესტიციდების მზარდმა გამოყენებამ გამოიწვია გარემოზე
ნეგატიური ზეგავლენის გაზრდა, ამიტომ აუცილებელი გახდა ვადაგასული პესტიციდების
უტილიზაცია. ამჟამად, მსოფლიოში ვადაგასული პესტიციდების ლიკვიდაცია ხდება
მაღალტემპერატურული დაწვით, დახურული ტიპის ღუმელებში გამავალი აირების სამსაფეხურიანი
გაწმენდით 1200⁰ C ტემპერატურაზე, რაც განაპირობებს პესტიციდების დაშლას აზოტამდე,
ჟანგბადამდე, ნახშირბადის დიოქსიდამდე და წყლის ორთქლამდე. მაგნიტური მოცილების
შედეგად ისინი აღარ აბინძურებენ გარემოს. ასეთი სახის მაღალმწარმოებლური ინჟინერატორები
განლაგებულია დასავლეთ ევროპის განვითარებულ ქვეყნებში და საკმაოდ ძვირია [1].

ქალაქ რუსთავის მახლობლად იაღლუჯის მთის კალთებზე შეიქმნა შემადგენელი დაუსახლებელი
ადგილი, სადაც ნიადაგი კლდოვანია ცხიმოვანი თიხის არანაკლებ 10 მ-იანი სისქის ზედა ფენით, რაც
განაპირობებს ჰიდროლოგიის და არის გარანტია პესტიციდების გაჟონვის თავიდან ასაცილებლად.

სამარხის ტერიტორიაზე განლაგდა 10 ბუნკერი ძლიერმოქმედი მოძწამვლელი ნივთიერებების
შესანახად. ეს ბუნკერები აგებული იყო რკინა-ბეტონისაგან 5X6 მ და გადახურული იყო ასევე რკინა-
ბეტონის ფილებით. საბჭოთა კავშირის დაშლის შემდეგ, სამწუხაროდ, მოხდა გაუვარგისეებული
პესტიციდების არასანქცონირებული ამოღება. სამუშაო ჯგუფის მიერ დადგენილ იქნა ოპტიმალური
პირობები ცენტრალიზებული სამარხის ტერიტორიაზე არსებულ 3 ღია თხრილში განლაგებულ
გაუვარგისეებული პესტიციდების მარაგის გაუვნებელყოფის მიზნით. რკინა-ბეტონის ბუნკერების
სიახლოვეს განლაგებულ პირველ თხრილში აღებული იქნა მთელ სიგრძეზე 5 ნიმუში (თხრილის
სიგრძე დაახლოებით არის 100 მ), ასევე მეორე და მესამე თხრილებიდან აღებული იქნა 5-5 ნიმუში.
თავდაპირველად შემოწმდა ნიმუშების მჟავიანობა. აღმოჩნდა, რომ პირველ თხრილში იგი მერყეობს
1.5-იდან 4-მდე, საშუალოდ pH=3. მეორე თხრილში საშუალოდ pH=5, ხოლო მესამეში- pH=1.5.
ამდენად, მაღალი მჟავიანობით გამოირჩევა პირველი და მესამე თხრილი. შემდგომში ბიორემედიაციის
მეთოდის გამოყენების მიზნით, მიკროორგანიზმების გააქტიურებისათვის აუცილებელია ოპტიმალური
pH=7.2-7.8 შექმნა, რისთვისაც შესაძლებელია ჩამქრალი კირის გამოყენება. ჩამქრალი კირი ერთი
მხრივ გაანეიტრალებს მჟავიანობას, მეორე მხრივ, დროთა განმავლობაში შესაძლებელია ქლორის
შებოჭვა და გადაყვანა უსაფრთხო მდგომარეობაში. ქრომატომასსპექტრომეტრული მეთოდით (GC/MS-
-6890/5973) კი გამოკვლეულ იქნა თითოეული თხრილიდან 5 ნიმუშში (სულ 15 ნიმუში)
ქლორორგანული ნაერთების შემცველობა. გაირკვა, რომ პირველ თხრილში ქლორორგანული
ნაერთების შემცველობა არ აღემატება 0.66%-ს, მეორე თხრილში – 1.38%-ს, ხოლო მესამეში –

1.84%-ს. ამდენად, სამივე თხრილში ნიადაგი შესაძლებელია დაექვემდებაროს მიკრობიოლოგიურ გადამუშავებას. ექსპერიმენტული სამუშაოს ჩატარების შედეგად დადგინდა გაუვარგისებული პესტიციდების და კირის ოპტიმალური თანაფარდობა, რომელიც უზრუნველყოფს საბოლოო ნეიტრალური არის შექმნას, რაც აუცილებელია მიკროორგანიზმების გააქტიურებისათვის. პირველი თხრილისთვის კირი : გაუვარგისებული პესტიციდის თანაფარდობა შეადგენს 2:1, მეორე თხრილში - 5:1, მესამე თხრილში - 3:2. უნდა აღინიშნოს, რომ ექსპერიმენტში კირთან ერთად გამოყენებულ იქნა ტორფის ფენა (მთლიანი მასის 20%), რათა შექმნილიყო ხელსაყრელი პირობები მიკროორგანიზმების გააქტიურებისათვის. ყველა აღნიშნულ შემთხვევაში თავდაპირველად განეიტრალეების შედეგად pH აღწევს 8-ს, ხოლო ერთი თვის შემდეგ მისი მნიშვნელობა გახდა უცვლელი pH - 7.5-ის დონეზე, რაც ყველაზე ოპტიმალურია მიკროორგანიზმების ცხოველმყოფელობისათვის [2]. შემდგომში ადგილობრივი მიკროორგანიზმების გააქტიურებისათვის ოპტიმალური პირობები (მჟავიანობის კორექცია, ჰუმინური მჟავების შემცველი მკვებავი ნარევი, სოკოების გასამრავლებელი მცენარეული სუბსტრატი-თხილის ნაჭუჭი, კომპოსტირება) შეიქმნება ადგილობრივი ბუნებრივი ნელეულის მაქსიმალური გამოყენებით [3]. ოპტიმალური პირობების შექმნა ადგილობრივი ბიოლოგიური აგენტების გააქტიურებისათვის საიმედო გზაა გაუვარგისების რაციონალური მოდელის შემუშავებისათვის. მთლიანობაში სამარხი განეიტრალდება და ნიადაგის ნაყოფიერება აღდგება. ორი დანარჩენი თხრილი კი შეიძლება სათანადო დამუშავების შემდეგ გამოყენებული იქნას სხვადასხვა მიზნებისათვის.



სურ. 1. თხილის ნაჭუჭის ანათალის მიკროსკოპული სურათი

კვლევის შედეგებმა აჩვენეს, რომ მცენარეული სუბსტრატის გამოყენების შემდეგ მეორე და მესამე თხრილში აღინიშნა ქლორის რაოდენობის შემცირება 30-35%-ით, რაც სავარაუდოდ განაპირობა თხილის ნაჭუჭზე სოკოს და მიკროორგანიზმების გაზრდამ (სურ.1). უაღრესად დიდი მნიშვნელობა აქვს ეკოლოგიურად უსაფრთხო ბიორემედიაციული მეთოდის საიმედოობის ამაღლებას, რაც მიიღწევა ბიოლოგიური აგენტების ერთობლივი მოქმედებით ადგილობრივი მიკროორგანიზმების და მცენარეების გამოყენებით მათი აქტიურობისათვის ოპტიმალური პირობების შექმნით. ასეთი მიდგომა სიახლეა და მეტად მნიშვნელოვანია ეკონომიკური ხელმისაწვდომობის გამო. მიღებული შედეგები შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას სხვა ქვეყნებშიც ანალოგიური სამარხების გაუვარგისებისათვის.

ჩვეულებრივ, ორგანული ნივთიერებების და ქიმიური წარმოების ნარჩენების გასაუვარგისებლად დიდი ხანია წარმატებით იყენებენ სხვადასხვა მიკროორგანიზმებს, რომელთაც შეუძლიათ ნიადაგიდან და წყლიდან სხვადასხვა ქიმიური დამაბინძურებლების დეგრადაცია. გარემოს გასუფთავების ბიორემედიაციული მეთოდი საკმაოდ ფართოდ გამოიყენება ასევე ნავთობპროდუქტებით დაბინძურებული ნიადაგების რეაბილიტაციისათვის [4]. გარდა ამისა, ბევრ მცენარეს აქვს უნარი შებოჭოს მანვე ნივთიერებები და ხელი შეუწყოს დაბინძურებული ნიადაგების გაუვარგისებას. მცენარის საშუალებით დაბინძურებული ნიადაგის გასუფთავების ფიტორემედიაციული მეთოდის გამოყენება ჩვეულებრივ შესაძლებელია და ეფექტურია სხვა მეთოდების გამოყენების შემდეგ [5, 6, 7].

ფიტორემედიაციის მეთოდის დანერგვა მოითხოვს დაბინძურებული ადგილების დეტალურ გამოკვლევას, იმ მცენარეების შერჩევას, რომლებიც იზრდებიან დაბინძურებულ ნიადაგზე. ფიტორემედიაციის ერთერთი ძირითადი ტექნოლოგიური მეთოდი ფიტოდეგრადაცია ან ფიტოტრანსფორმაციაა. ფიტორემედიაციული ტექნოლოგია ეფექტურია ალიფატური, არომატული პოლიციკლური ნახშირწყალბადებით, ასევე პესტიციდებით და სხვა ქიმიური ნივთიერებებით დაბინძურებული ნიადაგის შემთხვევაში. მაღალი ფიტორემედიაციის უნარით გამოირჩევიან ქერი,

პირშეშხა იონჯა, ხეებიდან მუხა, ჭადრი, კვიპაროსი, ტირიფი. მცენარეები ასევე აქტიურად ახდენენ ორგანული ტოქსიკანტების მეტაბოლიზმს. მოდელირებული ვეგეტაციური ცდების პირობებში დადგენილია ერთწლიანი მცენარეებით ნიადაგიდან ქლორორგანული პესტიციდების დაგროვების კოეფიციენტი. კერძოდ, ყაბაყში და ლობიოში დღტ-ს შემცველობა გადადის 10-დან -90%-მდე. დღტ-ს (1,1-დი-(4-ქლოროფენილ)-2,2,2-ტრიქლორეთანი) შემცველობა დამოკიდებულია ექსპერიმენტის ჩატარების პირობებზე. აქედან გამომდინარე, პესტიციდებით დაბინძურებული ნიადაგის გასაწმენდად შესაძლებელია გამოყენებული იქნას ერთწლიანი მცენარეები. ამდენად, ფიტორემედიაციის მეთოდის გამოყენება სასარგებლოა მცირე კონცენტრაციის დაბინძურებისას. მსოფლიო პრაქტიკიდან გამომდინარე 20 მგ/კგ კონცენტრაციის დაბინძურების შემთხვევაში, შესაძლებელია ეფექტური იყოს ფიტორემედიაცია და ნიადაგის კომპოსტირება მცენარეული ანარჩენებით, ფოთლებით და ა.შ.

ამგვარად, თითოეული დაბინძურებული ფართობის რეაბილიტაცია მრავალფაქტორიანი ამოცანაა და საჭიროებს კომპლექსურ მიდგომას ადგილობრივი პირობების და შესაძლებლობების მაქსიმალური გათვალისწინებით.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Felsot A.S., Racke K.D., Hamilton D.Y. Rev. Environ. Contam. Toxicol., 2003, v. 177, p. 123-200;
2. Dolidze A.V., Tsitsishvili V.G., Dgebuadze T.A., Mikadze I.I., Dolidze L.A. Neutralization of the stock of obsolete pesticides in Georgia, Proceeding the Georgian National Academy of Sciences, Tbilisi, 2007, # 3, v. 33, p. 350-354;
3. Моклячук Л.И., Андриенко Г.Г., Слободенюк Е.А. Фиторемедиационные техноло-гии - метод восстановления загрязненных пестицидами почв, 11 Межд. Конф. "Сотрудничество для расширения проблем отходов", 2005, Харьков, Украина;
4. Felsot A.S. Pesticide Remediation in Soil and Water, Editors – Kearney P.S., Roberts T.R. New York: Willey, 1998, p. 129-160;
5. Tylor M.L., Wentz J.A., Dosani M.A. Gallagher W., Greber J.S. Treating Chlorinates Wastes with the KPEG Process. Project Summary, EPA/600/S2-90/026, USE PA, Cincinnati, OH, 1990;
6. Tierman T.O., Wagel D.J., Garrett J.H. Van Ness G.F., Silchi J.G., Harden L.A. Chemosphere, 1998, v. 18, p. 835-841;
7. A. Citizen's Guide to Chemical Dehalogenation, Technology. Fact Sheet. EPA 542-F-96-004. Natuional Center for Environmental Publications Information, 1996, Cincinnati, OH.

POSSIBLE METHODS OF NEUTRALIZATION OF PESTICIDE STOCKS AND REMEDIATION OF CONTAMINATED SOILS IN GEORGIA

Irma Mikadze, Natia Barbakadze, Tamar Dgebuadze, Maia Japaridze, Ketevan Kochiashvili
*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
 at Iv. Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

For recycling of wastes of obsolete pesticides that were stored in uncontrolled conditions during the long term with different chemical compositions were chosen possible ways of bio-and phyto-remediation, remediation of contaminated soils with pre-selected plants were used as well, which allows to re-use it.

ВОЗМОЖНЫЕ МЕТОДЫ ПЕРЕРАБОТКИ ЗАПАСОВ НЕПРИГОДНЫХ ПЕСТИЦИДОВ И ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЗАГРЯЗНЕННЫХ ПОЧВ В ГРУЗИИ

И.И.Микадзе, Н.Г.Барбакадзе, Т.А.Дгебуадзе, М.З.Джапаридзе, К.Н.Кочиашивили
*Институт физической и органической химии им. П.Г. Меликишвили
 Тбилисского государственного университета им. Ив. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Для переработки отходов непригодных пестицидов различного химического состава, в связи с их долговременным неконтролируемым хранением, были выбраны возможные химические, био- и фиторемедиационные методы, а также использованы заранее выбранные растения для реабилитации загрязненных почв, что дает возможность их повторного использования.

Ti-Si სისტემის კონგლომერირებული ფხვნილებიდან მიღებული აირთერმული დანაფარების ალგორითმი სიმტკიცისა და მიკროსისალის კვლევა

მარინე ყიფიანი, ზურაბ ოქროსცვარიძე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

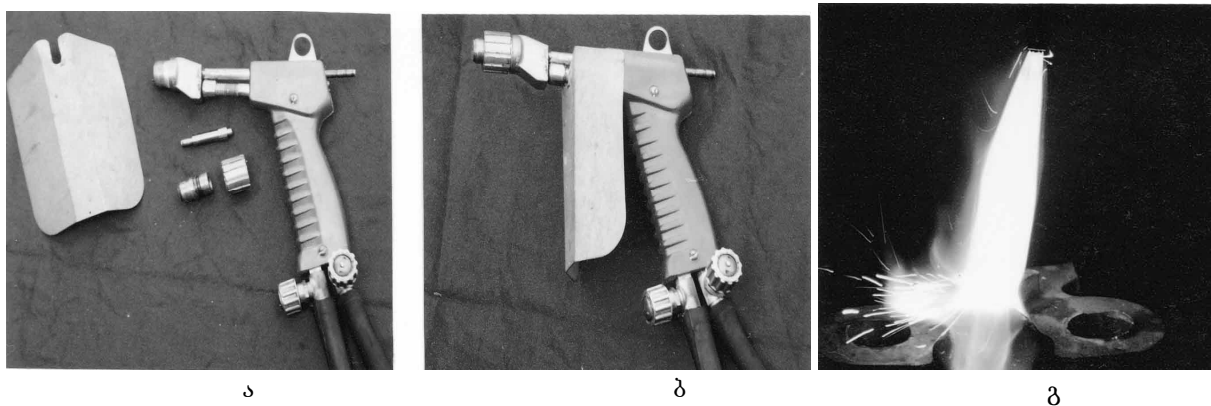
შემუშავებულია მაღალი თერმული ეფექტის მქონე ახალი კონგლომერირებული კომპოზიციური ფხვნილი, შემადგენლობით $Ti=77\%$; $Si=23\%$, რომლისაგანაც ხდება აირალური დამცავი დანაფარების მიღება. მიღებულ დანაფარებს გააჩნიათ უფრო მაღალი ადგეზიური სიმტკიცე და სისალე, ვიდრე ცნობილი, სტანდარტული Al-Ni და Ti-Ni თერმული ეფექტის მქონე ფხვნილებისაგან მიღებულ დანაფარებს.

ბოლოდროინდელმა მიღწევებმა, რომლებიც დაკავშირებულია ფხვნილების მეტალურგიის სფეროში მაღალხარისხიანი ფხვნილების ახალი მეთოდების და მიღების საშუალებების შემუშავებასთან, კიდევ უფრო დააჩქარეს აიროთერმული დამცავი დანაფარების ტექნოლოგიის სწრაფი განვითარება [2]. ამ მასალების ბოლო თაობა გამოირჩევა საკმაოდ გაუმჯობესებული ფიზიკო-ქიმიური და მექანიკური თვისებებით. უნდა აღინიშნოს, რომ შედეგად ამაღლდა დანაფარების დაფარვის დროს მიმდინარე პროცესების გაგების უნარი, თერმული დაფარვის ტექნოლოგიისადმი მომხმარებლის სანდობა.

დღესდღეობით, აირალური დანაფარების მისაღებად ხშირად იყენებენ კომპოზიციურ ფხვნილებს [3]. კომპოზიციურ ფხვნილებში კი განსაკუთრებულ ყურადღებას იპყრობს თერმულად მორეაგირე კომპოზიციური ფხვნილები [3]. მაღალტემპერატურულ არეში მოხვედრისას ასეთ ფხვნილებში მიმდინარეობს მაღალტემპერატურული ეგზოთერმული რეაქცია, რომლის შედეგადაც გამომტყორცნელი აპარატიდან დასაფარ ზედაპირამდე მოძრაობისას, ეს ფხვნილები გამოყოფენ დამატებით თბურ ენერგიას. საბოლოოდ აღნიშნული თერმოეფექტი დადებითად აისახება დანაფარის თვისებებზე. კერძოდ, მის შეჭიდულობის ხარისხზე, ასევე მის სხვა თვისებებზე [4].

შრომაში [1] წარმოდგენილი იყო მაღალი თერმოეფექტის მქონე Ti-Si კომპოზიცია, სადაც ავლნიშნეთ, რომ ტიტანის და სილიციუმის ურთიერთქმედების რეაქციის დროს ტემპერატურის ადიაბატური მატება ბევრად უფრო მაღალია, ვიდრე „კლასიკური“ (Al-Ni; Ti-Ni) სიტემების კომპოზიციების შემთხვევაში.

ამდენად, ჩვენს მიერ შერჩეული Ti-Si სისტემის ფხვნილების აირალური ალის ჩირაღდანში მოხვედრისას, მაღალი გადახურების გამო, მათგან მიღებულ დანაფარებს უნდა გააჩნდეთ დანაფარების კარგი შეჭიდულობა, ანუ ადგეზიური და კოგეზიური სიმტკიცე [1].



სურ. 1. აირალური დანაფარების მისაღები სანთურა

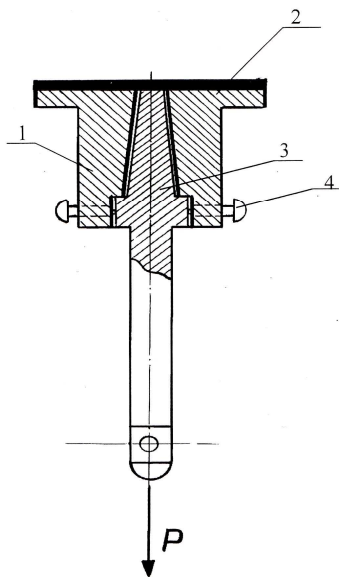
ა) დაშლილ და ბ) აწყობილ მდგომარეობაში; გ) სანთურის ალის საშუალებით დანაფარის ჩადნობა.

ამ მოსაზრების დასასაბუთებლად ჩატარებულ იქნა აირალური დამცავი დანაფარების მიღების ტექნოლოგიური პროცესი. დამცავი დანაფარები სისქით 3მმ მიღებულ იქნა უკრაინული წარმოების

დანადგართ JI 5405-ზე (სურ. 1). დანადგარის საორიენტაციო ფასი 10-20 ათას დოლარს შეადგენს. ანალოგიური შვეიცარული, ამერიკული და გერმანული წარმოების დანადგარები 35-40%-ით უფრო ძვირია. სამაგიეროდ, უკრაინული წარმოების JI5405 გამოირჩევა სტაბილური და საიმედო მუშაობით, სათადარიგო ნაწილების დამზადების შესაძლებლობით და რაც მთავარია, დასაშვებია, რომ მასზე იმუშაოს საშუალო კვალიფიკაციის პერსონალმა, სწორედ ამის გამო იქნა ჩვენს მიერ შერჩეული უკრაინული წარმოების დანადგარი.

დანადგარ JI 5405-ის ტექნიკური მახასიათებლები მოყვანილია ქვემოთ:

მუშა წნევა		
აცეტილენის	0,7-1 მპა	
პროპან-ბუტანის	2-2,5 მპა	
ჟანგბადის	2,5 მპა	
აირების ხარჯები		
აცეტილენის	1,5-2,7 მ ³ /სთ	
პროპან-ბუტანის	1,8-3,0 მ ³ /სთ	
ჟანგბადის	1,8-4,8 მ ³ /სთ	
შეკუმშული ჰაერის	0,6-2,4 მ ³ /სთ	
მაქს. წარმად. კერამიკული ფხვნილებისათვის		3 კგ/სთ
მოსახმარებელი სიმძლავრე		1,0 კვატ
გაბარიტული ზომები, მმ		626 X 400 X 134
წონა		75 კგ



დანადგარს ვლენობლით კონგლომერირებული კომპოზიციური ფხვნილის საშუალებით, რომლის შემადგენლობა იყო Ti=77%, Si=23%. დაფარვის დისტანცია შეადგენდა 150მმ-ს, ხოლო დანადგარის სისქე 3მმ-ს. დანადგარის ადგიური სიმტკიცეს ვსწავლობდით შტიფტის მეთოდით, რომლის სქემა მოყვანილია ნახ. 2-ზე.

ნახ. 2. შტიფტის მეთოდით დანადგარის შეჭიდულობის სიმტკიცის განსაზღვრის სქემა:

- 1 – დასაფარი მასალა;
- 2 – დანადგარი;
- 3 – შტიფტი;
- 4 – ფიქსატორები

შტიფტის მეთოდით გამოცდის სქემის მიხედვით, მატრიცასთან შეჭიდულობის ზონაში შტიფტის დიამეტრიც კონუსურად მცირდება დანადგარის მიმართულებით. ამით მიიღწევა გაზომვის სიზუსტის გაზრდა, თუმცა რთულდება გამოცდისათვის ნიმუშების დამზადება.

ქვემოთ მოყვანილ ცხრილში წარმოდგენილია დანადგარების ადგიური სიმტკიცე მპა-ში და მიკროსისალების მნიშვნელობები ცნობილი, „კლასიკური“, თერმოფექტის მქონე Ni-Al, Ti-Ni ფხვნილებისა [2] და ჩვენს მიერ წარმოდგენილი Ti-Si კონგლომერირებული ფხვნილების გამოყენების შემთხვევაში.

როგორც ცხრილიდან 1 ჩანს, ჩვენს მიერ წარმოდგენილ Ti-Si სისტემის დანადგარებს გააჩნიათ $\sigma_{ადგ.} = 55.3$ მპა, ხოლო მიკროსისალე ტოლია 9860 HV-ის, რაც საკმაოდ მაღალი მაჩვენებლებია დანადგარებისათვის.

ცხრილი 1. Ti_5Si_3 და სხვა „კლასიკური“ შემადგენლობის დამცავი დანაფარების ადგეზიური სიმტკიცე და სისალეები

სისტემა	შემადგენლობა	მიკროსისალე HV, მპა	ადგეზიური სიმტკიცე $\sigma_{ადგ.}$, მპა
Al-Ni	Al=15%; Ni=85%	3000	25,0
Al-Ni	Al=18%; Ni=82%	3800	27,5
Ti-Ni	Ti=45%; Ni=55%	8000	30,5
Ti-Si	Ti=77%; Si=23%	9860	55,3

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. მარინე ყიფიანი, ზურაბ ოქროსცვარიძე. Ti-Si სისტემის კონგლომერირებული ფხვნილების კვლევა. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2013, № 1-2, გვ. 118-123.
2. В.Н.Анцифоров, Г.В.Бобров, Л.К.Дружинин и др. Порошковая металлургия и напыленные покрытия. Москва: «Металлургия», 1987, с. 620-687.
3. S.Kuroda, J.Kawakita, M.Watanabe, H.Katanoda. “Warm spraying – a novel coating process based on high-velocity impact of solid particles”, Sci. Technol. Adv. Mater., 2008, v. 9.
4. http://ru.wikipedia.org/wiki/Газотермическое_напыление

INVESTIGATION OF ADHESION SOLIDITY AND MICRO-HARDNESS OF GAS-THERMAL COATING OBTAINED FROM Ti-Si SYSTEM CONGLOMERATED POWDERS

Marine Kipiani, Zurab Oqrostsvaridze
Georgian Technical University

SUMMARY

Developed was a new conglomerated composite powder possessing high-thermal efficiency, with composition of Ti=77%; Si=23%, by which obtained were gas-thermal protective coatings. The obtained coatings possess higher solidity and hardness, than the known, standard coatings obtained from the Al-Ni and Ti-Ni powders possessing thermal efficiency.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДГЕЗИОННОЙ ПРОЧНОСТИ И МИКРОТВЕРДОСТИ ГАЗОТЕРМИЧЕСКИХ ПОКРЫТИИ ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ КОНГЛОМЕРИРОВАННЫХ ПОРОШКОВ Ti-Si СИСТЕМЫ

Марине Кипиани, Зураб Окросцваридзе
Грузинский Технический Университет

РЕЗЮМЕ

Разработаны новые конгломерированные композиционные порошки с высоким термоэффектом. Составом Ti=77%; Si=23%, от которых получаем газотермические покрытия. Полученные покрытия имеют более высокую адгезионную прочность и твердость, чем покрытия полученные от стандартных Al-Ni; Ti-Ni термоэффектных порошков.

ქიმიური ტექნოლოგია

დავით ბარეჯის ბარიტ-პოლიმეტალური საბადოს გადამხურავი ქანები – არატრადიციული ნედლეული მინის და ცემენტის ალბილობრივი წარმოებისათვის

მურად ტყემალაძე, ელენე შაფაქიძე

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
კავკასიის ალექსანდრე თვალჭრელიძის მინერალური ნედლეულის ინსტიტუტი*

განხილულია დავით გარეჯის ბარიტ-პოლიმეტალური საბადოს გადამხურავი ქანების – კვარც-აღულარიანი მეტასომატიტების (კამ) გამოყენების მიზანშეწონილობა, როგორც ფერადი მინის ტარის, ასევე ცემენტის წარმოებაში ნედლეული სახით. ლაბორატორიულ პირობებში მაღალტემპერატურული ხარშვების შედეგად კამ-ის საფუძველზე მიღებულია ღია მწვანე ფერის მინები, რომელთა ტექნოლოგიური თვისებების შესწავლამ დაადგინა მათი სტანდარტის მოთხოვნებთან სრული შესატყვისობა. ხოლო ცემენტის კლინკერის ლაბორატორიული სინთეზის პირობებში დადგინდა, რომ კამ-ის შემადგენლობაში არსებული $BaSO_4$ ასრულებს მინერალიზატორის, მოდიფიკატორის და მალეგირებელი დანამატის ფუნქციას ერთდროულად, რაც კლინკერის და ცემენტის მთელ რიგ ტექნოლოგიურ თვისებებს აუმჯობესებს.

მინის და ცემენტის წარმოება საქართველოში მაღალკონდიციური ნედლეულის დეფიციტს განიცდის, რაც ამ დარგების განვითარებისთვის ხელისშემშლელ პირობას წარმოადგენს. აღნიშნულიდან გამომდინარე, განსაკუთრებულ აქტუალობას იძენს ადგილობრივი იაფფასიანი არატრადიციული ნედლეულის და რიგი საწარმოო ნარჩენების გამოყენება.

ამ თვალსაზრისით თავისი მინერალოგიურ-პეტროგრაფიული და ქიმიური შემადგენლობით დიდ ყურადღებას იპყრობს სამხრეთ-აღმოსავლეთ საქართველოს კვარცმინდვრისშპატური წარმონაქმნები, კერძოდ, დავით გარეჯის ბარიტ - პოლიმეტალური საბადოს გადამხურავი ქანები.

ამ ქანების დეტალური კვლევისადმი ინტერესი განპირობებულია რამდენიმე მოსაზრებით:

პირველი - ქვეყანაში მინის წარმოების კვლავ აღორძინების მიზნით, ადგილობრივი არატრადიციული იაფი ნედლეულის მოძიება. მინერალოგიურ - ქიმიური შედგენილობით აღნიშნული ქანები, კერძოდ - კვარც-აღულარიანი მეტასომატიტები (შემდგომში-კამ) პასუხობენ კვარცმინდვრისშპატური ნედლეულისადმი წაყენებულ მოქმედ სტანდარტის მოთხოვნებს. შესწავლის შედეგად დადგინდა, რომ ისინი წარმოადგენენ კომპლექსურ მასალებს და შეიცავენ ყველა ძირითად მინაწარმოქმნელ ოქსიდებს: SiO_2 -65-85%, Al_2O_3 -6-14%, N_2O+K_2O - 6-14%, Fe_2O_3 -0,5-4%. მათ შეუძლიათ მთლიანად ან ნაწილობრივ ჩაანაცვლონ ისეთი ძვირადღირებული შემოსატანი კომპონენტები, როგორცაა თიხამიწა, კვარცის ქვიშა და სოდა.

მეორე - აქტუალურია კამ-ის გამოყენება ცემენტის წარმოებაში, როგორც კლინკერის ნედლეულის კაზმში თიხური კომპონენტების ნაწილობრივ შემცვლელის. კამ-ში $BaSO_4$ -ის შემცველობა კლინკერის სტრუქტურას მნიშვნელოვნად აუმჯობესებს და ასრულებს მინერალიზატორის, მოდიფიკატორის და მალეგირებელი დანამატის ფუნქციას ერთდროულად.

მესამე - ეკონომიკური თვალსაზრისით გადამხურავი ქანების შესწავლა და შემდგომში დამუშავება ძალზე მომგებიანია, ვინაიდან ისინი ბარიტის მადნებთან ერთად წარმოშობენ კომპლექსურ საბადოს, რაც ზრდის მათი დამუშავების რენტაბელობას.

დავით გარეჯის ბარიტ-პოლიმეტალური საბადო მდებარეობს სამხრეთ საქართველოში - ბოლნისის რაიონში, მდინარე მაშავერას მარჯვენა ნაპირზე.

საბადოს გადამხურავი ქანები წარმოდგენილი არიან თეთრი, მონაცისფრო, მოყვითალო-მოვარდისფრო რიოლითური შედგენილობის თხელი და საშუალომრეებრივი ტუფების, ტუფოალევირლიტების, ვულკანოიქტური ქვიშაქვების მრავალჯერადი მორიგეობით. აღმავალ ჭრილში მათ მოჰყვება რიოლითური ლავური განფენები, იგნიმბრიტები (ფსევდოიგნიმბრიტები, შემცხვარი ტუფები) და მსხვილნატეხოვანი ტუფები. აღწერილი წყების ქვედა ნაწილი, რომელიც უშუალოდ მოჰყვება ბარიტის მადანშემცველ ქანებს მეორადი შეცვლების ხასიათით (ჰიდროთერმული მეტამორფიზმი) შეესაბამება მეორადი კვარციტების ფაციესს და გეოლოგიურ ლიტერატურაში აღწერილია კვარც-აღულარიანი მეტასომატიტების სახელით. ზედა ნაწილი კი რომელიც

წარმოდგენილია ქლორიტ-კარბონატ-ცეოლითური ფაციესით პასუხობს შედარებით დაბალტემპერატურულ პროპილიტიზაციის პროცესს.

პეტროგრაფიული და პეტროქიმიური კვლევებით დადგინდა, რომ კვარც-აღულარიანი მეტასომატიტების დასტა აგებულია მკვრივი, მეტასომატურად შეცვლილი სხვადასხვანატიტოვანი ბიოტიტიანი და იშვიათად რქატყუარიანი-ბიოტიტიანი რიოლითური ტუფებით.

გადამხურავი ქანები ზედ აკრავს ბარიუმის მადანს, რის გამო ბარიტიზაციის პროცესი გადამხურავი კამ-ის ქანებში მეტნაკლები ინტენსივობით საყოველთაოდაა გავრცელებული, თუმცა აღმავე ჭრილში მისი კვლების ტენდენცია ისახება.

წინამდებარე კვლევის მიზანია ადგილობრივი არადეფიციტური ბუნებრივი ნედლეულის – კამ-ის მეშვეობით ტრადიციული ნედლეულის მთლიანად ან ნაწილობრივ ჩანაცვლება მინისა და ცემენტის წარმოებაში, რის შედეგად გაუმჯობესდება ადგილობრივი წარმოებების ტექნოლოგიური და ტექნიკურ-ეკონომიკური მაჩვენებლები.

ლაბორატორიულ პირობებში მაღალტემპერატურული ხარშვების შედეგად მიღებულია ღია მწვანე ფერის მინები, რომელთა ტექნოლოგიური თვისებების შესწავლამ დაადგინა კამ-ის გამოყენების შესაძლებლობა ფერადი მინის ტარის წარმოებაში. ზემოთ აღნიშნული ქანების შეყვანით მინის კაზმის შემადგენლობაში, ამ უკანასკნელიდან მთლიანად გამოირიცხება თიხამიწაშემცველი ნედლეული, ხოლო კვარცის ქვიშისა და სოდის შემცველობა მცირდება, შესაბამისად 50-60 % და 20-25 %-ით [1, 2].

კამ-ი თავისი ქიმიური შემადგენლობით ახლოს დგას ცემენტის წარმოებაში გამოყენებული თიხური კომპონენტის შემადგენლობასთან, რაც კამ-ით თიხური კომპონენტის ნაწილობრივ შეცვლის საშუალებას იძლევა. ამავე დროს კამ-ს გააჩნია უფრო მაღალი სილიკატური მოდული ვიდრე თიხას, რაც ცემენტის კლინკერის მაღალ სიმტკიცეს ანიჭებს. გადრა ამისა BaO და SO₃ ასრულებენ მინერალიზატორის, მოდიფიკატორის და მალევირებელი დანამატის ფუნქციას ერთდროულად, რაც კლინკერის და ცემენტის მთელ რიგ ტექნოლოგიურ თვისებებს აუმჯობესებს [3, 4].

ქვემოთ მოყვანილ ცხრილში ნაჩვენებია ბარიუმშემცველი კამ-ის ქიმიური შემადგენლობები.

ცხრილი 1. ბარიუმშემცველი კამ-ის ქიმიური შემადგენლობები

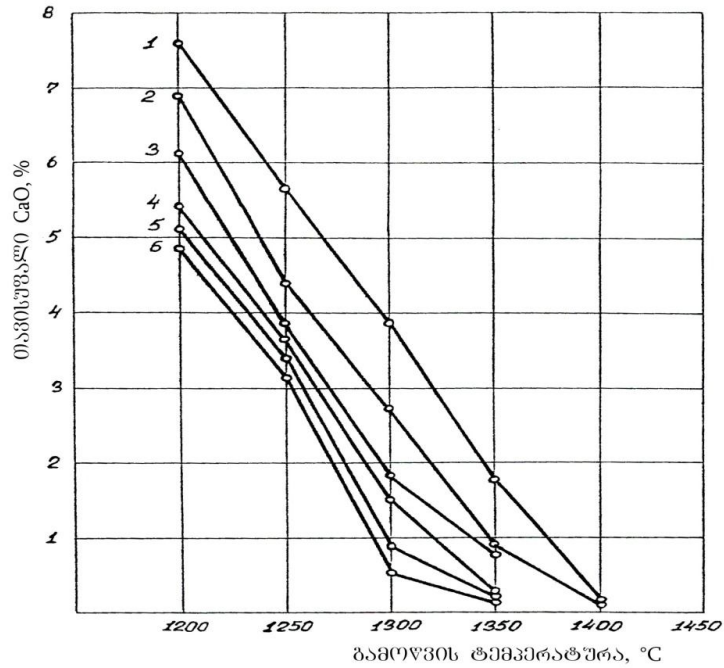
კამ-ის №	ოქსიდების შემცველობა, მას. %								
	ხ.დ.	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	BaO	R ₂ O
1	0.21	79.00	7.93	0.56	0.13	1.32	1.92	3.28	5.36
2	0.48	76.80	6.80	0.43	0.22	1.02	3.42	5.69	5.11
3	0.15	72.80	8.32	0.56	0.15	0.54	4.05	7.75	5.41
4	0.11	71.52	7.22	0.49	0.17	1.21	5.11	9.79	4.33
5	0	68.06	7.12	0.46	0.22	0.31	6.31	12.09	5.42

ცემენტის კლინკერის კაზმების შესადგენად გამოყენებული იქნა დედოფლიწყაროს კირქვა, რუსთავის თიხა და რკინის ნამწვი. შესადარებლად შედგენილ იქნა საკონტროლო კაზმი - №1, რომელიც მხოლოდ ტრადიციული ნედლეულის საფუძველზე იქნა დამზადებული (ცხრ. 2).

ცხრილი 2. კაზმების ნივთიერი შემადგენლობები

კაზმის №	ნედლეული კომპონენტების შემცველობა, მას. %			
	კირქვა	თიხა	რკინის ნამწვი	კამ-ი
1	68.70	28.84	2.45	—
2	70.97	22.41	2.29	4.34(№1)
3	70.73	22.78	2.26	4.23(№2)
4	70.88	21.79	2.31	5.02(№3)
5	70.64	22.29	2.28	4.79(№4)
6	70.51	22.10	2.28	5.11(№5)

კლინკერების გამოწვა ხდებოდა ლაბორატორიულ მაღალტემპერატურულ ლუმელში. გამოწვის პროცესის დასრულების ხარისხი მოწმდებოდა თავისუფალი CaO-ს შემცველობის მიხედვით (ნახ. 1).



ნახ. 1. თავისუფალი CaO-ს შებმის კინეტიკა კლინკერებში BaO-ს შემცველობისა და გამოწვის ტემპერატურის მიხედვით

როგორც ექსპერიმენტებმა ცხადყო, საკონტროლო №1 კაზმისთვის გამოწვის ოპტიმალური ტემპერატურაა 1400°C მაშინ, როდესაც კამ-ის შეყვანით კაზმში (რაც უზრუნველყოფს მასში BaO-ს გარკვეულ შემცველობას, იხ. ცხრ. 3.) ადგილი აქვს გამოწვის მაქსიმალური ტემპერატურის დაწევას 50 – 70°C-ით. თავისუფალი CaO-ს ოპტიმალურად ათვისებას ადგილი აქვს №3, 4 და 5 კაზმებში, რაც შეესაბამება კლინკერებში 0.36, 0.58 და 0.7 % BaO-ს. BaO-ს შემცველობის გაზრდით 0.92 %-მდე კაზმი ძნელადშეცხობადი ხდება, თუმცა უღანამატოსთან შედარებით მაინც 30°C-ით დაბალია მისი გამოწვის ტემპერატურა.

ცხრილი 3. კაზმების / კლინკერების ქიმიური შემადგენლობები, მას. %

№	ხ.დ.	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	BaO	R ₂ O	KH	N	p
1	33.35	13.63	4.47	3.45	42.85	1.37	0.13	-	0.76	0.9	1.7	1.29
	-	20.45	6.70	5.18	64.30	2.05	0.19	-	1.13			
2	33.35	14.14	3.90	3.01	43.05	1.34	0.21	0.14	0.86	0.9	2.05	1.29
	-	21.22	5.84	4.51	64.60	2.02	0.31	0.21	1.28			
3	33.32	14.12	3.89	3.00	42.98	1.33	0.27	0.24	0.85	0.9	2.05	1.29
	-	21.18	5.83	4.51	64.46	2.00	0.40	0.36	1.27			
4	33.22	14.10	3.88	3.00	42.90	1.30	0.33	0.39	0.88	0.9	2.05	1.29
	-	21.11	5.81	4.49	64.25	1.95	0.49	0.58	1.32			
5	33.19	14.08	3.88	3.00	42.86	1.34	0.37	0.47	0.83	0.9	2.05	1.29
	-	21.07	5.80	4.48	64.15	2.00	0.55	0.70	1.24			
6	33.10	14.05	3.87	2.99	42.75	1.29	0.44	0.62	0.89	0.9	2.05	1.29
	-	20.99	5.78	4.47	63.90	1.93	0.66	0.92	1.33			

კლინკერები დაიფუძვრა ლაბორატორიულ ბურთულეებთან წისქვილში 5% ბუნებრივი ორწყლიანი თაბაშირის დამატებით, 2700 – 3000 სმ²/გ ხვედრითი ზედაპირის მიღწევამდე. მიღებული ცემენტებიდან დამზადდა ნორმალური კონსისტენციის ცომი და დაყალიბდა 2X2X2 სმ ზომის კუბიკები, რომლებიც 28 დღე-ღამის განმავლობაში მაგრდებოდა წყალში და შემდეგ გამოცადა ლაბორატორიულ ჰიდრაულიკურ წნეხზე.

ცხრილში 4 მოყვანილია ცემენტების ფიზიკურ-მექანიკური გამოცდების შედეგები.

ცხრილი 4. ცემენტების ფიზიკურ-მექანიკური გამოცდების შედეგები

№	დამატებული წყლის რაოდენობა, %	შეკვრის ვადები, სთ.-წთ.		სიმტკიცის ზღვარი კუმშვაზე, მგა		
		დასაწყისი	დასასრული	3 დღ.დ.	7 დღ.დ.	28 დღ.დ.
1	28	2 - 20	3 - 45	56	61	95
2	28	2 - 20	3 - 30	55	69	98
3	28	2 - 30	3 - 55	62	78	110
4	27.5	2 - 15	4 - 05	68	83	112
5	27.5	2 - 25	3 - 55	65	80	109
6	28	2 - 20	3 - 50	57	67	99

ამრიგად, კამ-ის დამატება კლინკერის კაზმის შემადგენლობაში უზრუნველყოფს კლინკერის გამოწვის ტემპერატურის 50 – 70⁰C-ით დაწევას და ცემენტის, როგორც ადრეული (3 დღ.დ.) ასევე სამარკო (28 დღ.დ.) სიმტკიცის მომატებას ტრადიციულ ნედლეულზე დამზადებულ კლინკერებთან შედარებით. მიღებული შედეგებიდან გამომდინარე ოპტიმალურად შეიძლება ჩაითვალოს 0.3-დან 0.7 %-მდე BaO-ს არსებობა კლინკერში.

როგორც ზემოთმოყვანილი ლაბორატორიული კვლევები გვიჩვენებს, კამ-ის გამოყენება ნედლეულის სახით მიზანშეწონილია, როგორც ფერადი მინის ტარის, ასევე ცემენტის წარმოებაში. მინის შემთხვევაში ადგილი ექნება წარმოების ტექნიკურ-ეკონომიკური პარამეტრების გაუმჯობესებას ძვირადღირებული ნედლეულის ჩანაცვლების ხარჯზე ადგილობრივი იაფფასიანი ნედლეულით. ხოლო ცემენტის წარმოებაში მოსალოდნელია კლინკერის გამოწვაზე სათბობ-ენერგეტიკული ხარჯების შემცირება და ცემენტის ხარისხის ამაღლება, რაც თავის მხრივ წარმოების ტექნიკურ-ეკონომიკურ პარამეტრებზე დადებითად აისახება. ყურადსაღებია, რომ მინის წარმოებისთვის მიზანშეწონილია საბადოს გადამსურავი ქანების იმ უბნების კამ-ის გამოყენება, რომლებიც BaO შედარებით დაბალი - 2 მას.%-მდე შემცველობით გამოირჩევიან, ხოლო ცემენტის კლინკერის წარმოებისთვის კი BaO შემცველობა შეიძლება მერყეობდეს 3-დან 15 მას.%-მდე.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. გეჯაძე ი., ნადარეიშვილი ვ., ტყემალაძე მ., შაფაქიძე ე., მაჭავარიანი თ. სამხრეთ-აღმოსავლეთ საქართველოს კვარცმინდვრის შპატური ქანების გამოყენების პერსპექტივები სატარე მინის წარმოებაში. ჟ."სამთო ჟურნალი", თბილისი, 2008, №1-2(20-21), გვ.5-7.
2. Габунія Л.В., Надарейшвили Г.Ш., Геджадзе И.В., Шапакидзе Е.В., Мачавариანი О.Н., Ткемаладзе М.В., Кавтарაძე С.И. Вскрышные породы Давид Гареджи-Мушеванского месторождения, как сырье для стекольной промышленности Грузии. საქართველოს კერამიკოსთა ასოციაციის მე-2 საერთაშორისო კონფერენციის მასალები, თბილისი, 2009, გვ.151-154.
3. Шапакидзе Е.В., Надарейшвили Г.Ш., Майсурадзе В.Н., Надирашвили М.Р., Ткемаладзе М.В. Перспективы использования вскрышных пород баритовой руды Давид Гареджского месторождения в производстве цемента. კმნი-ს საიუბილეო შრომათა კრებული, თბილისი, 2009, გვ.412-415.
4. Shapakidze E., Maisuradze V., Nadirashvili M., Melqadze O., Kavtaradze S., Tkemaladze M. Investigation of the possibility of barium containing cinker production using volcanic rocks. მასალათა შემსწავლელ მეცნიერებათა I საერთაშორისო კონფერენციის მასალები. თბილისი, 2010. WWW/ECERS-11CSYS.GE.

**CAP ROCKS OF BARITE-POLYMETALLIC DEPOSIT OF DAVID-GAREDJI –
NON-TRADITIONAL RAW MATERIAL IN LOCAL INDUSTRY OF GLASS AND CEMENT**

Murad Tkemeladze, Elena Shapakidze

*Ivane Javakhishvili Tbilisi State University
Caucasian Alexander Tvalchrelidze Institute of Mineral Resources***SUMMARY**

Expediency of use of cap rocks of barite-polymetallic deposit of David-Garedji - the quartz-adular metasomatites (QAM), as raw material in production, both color glass container, and cement is considered. With the use of QAM in vitro by means of high-temperature cooking, glasses of light green color, which by technological properties completely conform to standards, are received. As for laboratory synthesis of cement clinker, it is established that $BaSO_4$, which contains in QAM, plays function of a mineralizer, the modifier and an alloying additive at the same time, that improves a number of technological properties of clinker and cement.

**ВСКРЫШНЫЕ ПОРОДЫ БАРИТО-ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКОЙ РУДЫ
ДАВИД-ГАРЕДЖСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ – НЕТРАДИЦИОННОЕ СЫРЬЕ ДЛЯ
МЕСТНОЙ СТЕКОЛЬНОЙ И ЦЕМЕНТНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

М.В.Ткемаладзе, Е.В.Шапакидзе

*Тбилисский Государственный Университет им. Иванэ Джавахишвили
Кавказский Институт Минерального Сырья им. Александра Твалчрелидзе***РЕЗЮМЕ**

Рассмотрена целесообразность использования вскрышных пород барито-полиметаллической руды Давид-Гареджского месторождения – кварц-адуляровых метасоматитов (КАМ) в качестве сырьевого компонента в производстве как цветной стеклянной тары, так и цемента. На основе КАМ в лабораторных условиях при помощи высокотемпературной варки получены стекла светло-зеленого цвета, которые по технологическим свойствам полностью соответствуют стандартам. Что касается лабораторного синтеза цементного клинкера, установлено, что $BaSO_4$, который содержится в КАМ-е, играет функцию минерализатора, модификатора и легирующей добавки одновременно, что улучшает целый ряд технологических свойств клинкера и цемента.

ქიმიური ტექნოლოგია

წებოს კომპოზიცია ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის ბაზაზე ნანოტექნოლოგიების გამოყენებით

მიმოხა ქარქაშაძე, ნატალია ლომთაძე, ჟორჟ რევიშვილი, ლარისა შანიძე

ქუთაისის აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

წებოს მეთოდი ერთ-ერთი ყველაზე პერსპექტიული მეთოდია ფენსაცმელზე ძირის მისამაგრებლად. ამ მიზნით ძირითადად გამოიყენება წებო-ხსნარები ორგანული გამხსნელების ბაზაზე. ეს წებოები ერთის მხრივ ხასიათდებიან კარგი ტექნოლოგიური და საექსპლუატაციო თვისებებით, მაგრამ მეორეს მხრივ მათი გამოყენების პროცესი არაავტომატიზირებულია, ეს კი ზრდის ფენსაცმლის დამზადების შრომატევადობას, გარდა ამისა, ეს წებოები ტოქსიკურია, რაც ნეგატიურად მოქმედებს გარემოს მდგომარეობაზე და ადამიანის ჯამრთელობაზე. ამ მხრივ ლობადი წებოები პერსპექტიულია, ვინაიდან ისინი არატოქსიკურია, აგრეთვე პასუხობს წარმოების მექანიზაციისა და ავტომატიზაციის მოთხოვნებს. ამ წებოების დასამზადებლად შეიძლება გამოყენებული იქნას სხვადასხვა თერმოსტაბილური პოლიმერები. ფენსაცმლის მრეწველობაში დაგროვილი მრავალწლიანმა გამოცდილებამ აჩვენა, რომ ფენსაცმლის ძირის მისამაგრებლად უფრო პერსპექტიულია ლობადი წებო ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის ბაზაზე, მაგრამ მისი გამოყენება შეზღუდულია დაბალი თერმოსტაბილურობის გამო. მოცემული პრობლემის გადაწყვეტა შესაძლებელია წებოს კომპოზიციის მოდიფიცირებადი კომპონენტების სწორად შერჩევით, ანდა შესაწებებელი მასალის ზედაპირის მოდიფიკაციით. უკანასკნელი მეთოდი დაკავშირებულია მატერიალურ – და შრომადანაკარგების ზრდასთან, რაც უმრავლეს შემთხვევაში მიზანშეწონილი არაა. უფრო ოპტიმალურია წებოს ძირითადი პოლიმერისათვის მოდიფიცირებადი დანამატების ნანონაწილაკების შერჩევა.

წებოს კომპოზიციის მოდიფიკაციის ყველა სახეობიდან ყველაზე პერსპექტიულად ითვლება შემავსებლები და თერმოსტაბილიზატორები, რადგან ერთის მხრივ ისინი ამცირებენ წებოს თვითღირებულებას, ხოლო მეორეს მხრივ ახდენენ კომპოზიციის ახალი თვისებების კომპლექსის ფორმირებას. ასეთი მოდიფიკატორები ცნობილია აქტიური მოდიფიკატორების სახით.

ნანოდანამატები ხელს უწყობს ახალი ტექნოლოგიური და საექსპლუატაციო თვისებების წებოს მიღებას რაც წარმოადგენს ნანონაწილაკებისა და პოლიმერის ფაზათაშორისო (აღსორბციული ან მოლეკულათშორისო) ურთიერთმოქმედების შედეგს. ისინი წარმოადგენენ ფაზათაშორისო საზღვარზე ადჰეზიის გარანტს. წებოს კომპოზიციის შემუშავებისას ნანოშემავსებლების გამოყენებისას მოლეკულათშორისო ძალების ურთიერთმოქმედების შედეგად მიიღწევა დადებითი ეფექტი.

შესწავლილი იქნა ხუთი სახის ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერი, რომლებიც განსხვავდებოდა ვინილაცეტატის პროცენტული შემცველობით. მათი მოკლე დახასიათება მოცემულია ცხრილში 1.

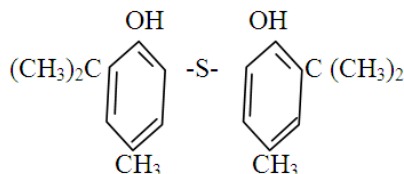
ცხრილი 1. ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერების დახასიათება

პირობითი აღნიშვნა	თანაპოლიმერის შემადგენლობა, %		ნაწილობის ინდექსი, გ/10 წთ
	ეთილენი	ვინილაცეტატი	
C ₁	84,0	16,0	12
C ₂	75,0	25,0	190
C ₃	74,8	25,2	136
C ₄	72,5	27,5	168
C ₅	67,0	33,0	200-ზე მეტი

პირველ ეტაპზე შემოწმებული იქნა თანაპოლიმერის თერმოსტაბილურობა. დადგენილი იქნა, რომ 16% ვინილაცეტატის შემცველობის ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის (C₁) სიბლანტე 150-160 °C ტემპერატურაზე მკვეთრად იზრდება 30 წთ-ის შემდეგ, ხოლო 33% ვინილაცეტატის

შემცველობის პოლიმერის (C₅) კი მხოლოდ 1,5 სთ-ის შემდეგ. ეს შედეგები არადაამაკმაყოფილებელია, რადგან ფენსაცმლის საწარმოში თანაპოლიმერი ზემოქმედების ქვეშ იმყოფება არანაკლებ 8 სთ განმავლობაში, რაც ართულებს მის გამოყენებას, ამიტომ აუცილებელია შეირჩეს თერმოსტაბილიზატორი, რომელიც განაპირობებს მის კარგ თერმოსტაბილურობას.

ყველაზე კარგი შედეგი მიღებული იქნა სტაბილიზატორის CaO – 6 გამოყენებით მოლეკულური მასით 382, ლლობის ტემპერატურით - 100⁰C და სტრუქტურული აგებულებით:



შერჩეული სტაბილიზატორის ეფექტურობა დამტკიცებული იქნა გაცხელებისას თანაპოლიმერის სტაბილიზატორის განსაზღვრის შედეგებით. თუკი სტაბილიზატორის გარეშე ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის სიბლანტის ზრდა შეინიშნებოდა 30 წთ-ის შემდეგ, სტაბილიზატორის შეყვანისას 8 სთ-ის შემდეგაც კი სიბლანტის არანაირ ცვლილებას ადგილი არ ჰქონია. ამრიგად მოცემული სტაბილიზატორის შეყვანა განაპირობებს კარგ თერმოსტაბილურობას ანუ ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის ხანგრძლივ “სიცოცხლისუნარიანობას”.

ეთილენისა და ვინილაცეტატის ბაზაზე წებოს კომპოზიციის ადჰეზიური თვისებების გაუმჯობესებისათვის ამ კომპოზიციების შემადგენლობაში შეყვანილი იქნა კანიფოლის მოდიფიცირებული ეთერის სხვადასხვა სახეები. შედარების მიზნით გამოყენებული იქნა არამოდიფიცირებული კანიფოლიც. ამ მასალების დახასიათება მოცემულია მე-2 ცხრილში. ნარევი სტაბილიზატორის რაოდენობა შეადგენდა 0,8-1,0%

ცხრილი 2. ეთილენისა და ვინილაცეტატის ბაზაზე წებოს კომპოზიციის ადჰეზიური თვისებები

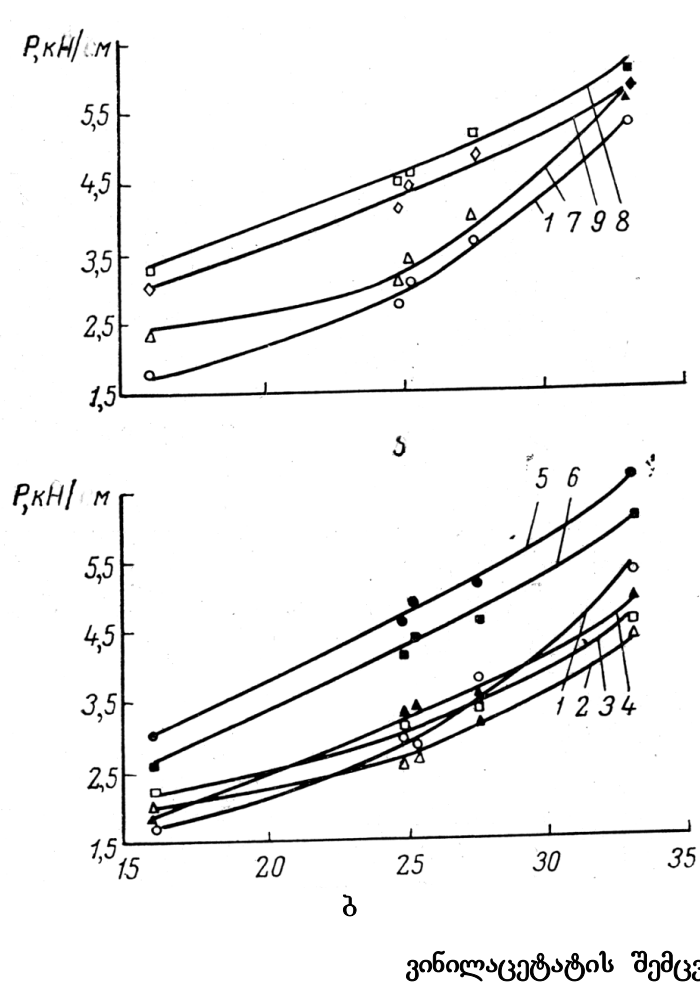
მოდიფიკატორის დასახელება და პირობითი აღნიშვნა	მოდიფიკატორის დახასიათება	ლლობის ან დარბილების ტემპერატურა, ⁰ C
ფიჭვის კანიფოლი (K ₁)	შედგება ძირითადად ფისის მჟავისაგან C ₂₀ H ₃₀ O ₂	60
ფისი პემაკი (K ₂)	წარმოადგენს პენტაერთითრეტულ სპირიტს, ფიჭვის კანიფოლისა და მალეინის ანჰიდრიდის რთულ ეთერს	120-140
კანიფოლ-მალეინის ფისი KM (K ₃)	წარმოადგენს გლიცერინულ პოლიეტერს	110-125
კანიფოლი პენტაერთითრეტული ეთერი (K ₄)	წარმოადგენს პენტაერთითრეტის სპირტისა და ფიჭვის კანიფოლის რთულ ეთერს C ₅ H ₈ (C ₂ OH ₂₉ O ₂)	არანაკლები 100
კანიფოლის გლიცერინული ეთერი	წარმოადგენს სამატომიანი სპირტ-გლიცერინის და ფიჭვის კანიფოლის ფისის მჟავის რთულ ეთერს C ₃ H ₅ O ₃ (C ₂ OH ₂₉ O) ₃	არანაკლები 70

წებოს შეწებების უნარი მოწმდებოდა სტანდარტულ ნიმუშებზე ზომით 25-140მმ. ზედაპირის მასალად გამოყენებული იყო შვედო, ხოლო ძირის მასალად ქრომცენარეული მეთოდით დათრიმლული მსხვილფეხა რქოსანი საქონლის ტყავი. საძირე ტყავის ნიმუშების ზედაპირის დაფარვა წარმოებდა ლლობადი წებოს აფსკით. წებოწასმული საძირე ნიმუშები და წებოწაუსმელი საზედაპირე მასალის ნიმუშები განიცდიდა თერმოაქტივაციას 135-150⁰C –ზე 30-60 წმ განმავლობაში, რომლის შემდეგაც ხდებოდა მათი დაწნეხვა 0,5-0,6 მეგპა წნევით 45-60 წმ. განმავლობაში. შეწებების ეს რეჟიმი უცვლელი იყო კვლევის ყველა ობიექტისათვის. შეწებილი ნიმუშების დაფოვნება ხდებოდა 24 სთ-ის განმავლობაში, რომლის შემდეგაც მათი გამოცდა მიმდინარეობდა დინამომეტრზე PT-250 ქვედა

დამჭერის 100მმ/წთ მოძრაობის სიჩქარისას. თითოეული ვარიანტისათვის მომზადებული იქნა 10-10 ნიმუში, დასაშვები ცდომილება არ აღემატებოდა $\pm 5\%$.

შეწებების სიმტკიცის მაჩვენებლები მოცემულია ნახ.1ა და 1ბ. როგორც ნახაზიდან ჩანს ორივე შემთხვევაში საუკეთესო შედეგი მიღწეული იქნა თანაპოლიმერის შემადგენლობაში კანიფოლის მოდიფიცირებული ეთერების K_4 და K_5 შეყვანით.

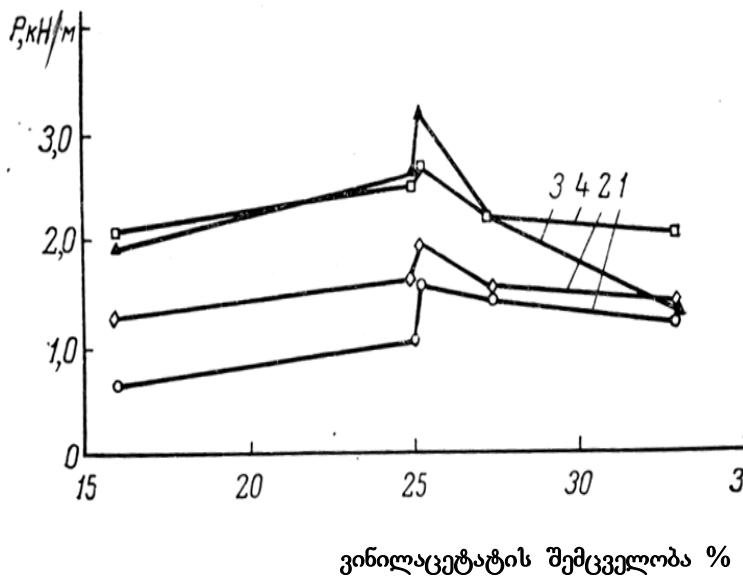
ნახ.2-ზე მოცემულია ლლობადი წებოს თერმომედეგობის შედეგები, რომელიც მოწმობს, რომ თანაპოლიმერის ნარევი 25-დან 27,5%-მდე ვინილაცეტატის შემცველობისას აკმაყოფილებს თერმული ზემოქმედების შედეგად წებოს სიმტკიცის შენარჩუნების მოთხოვნებს.



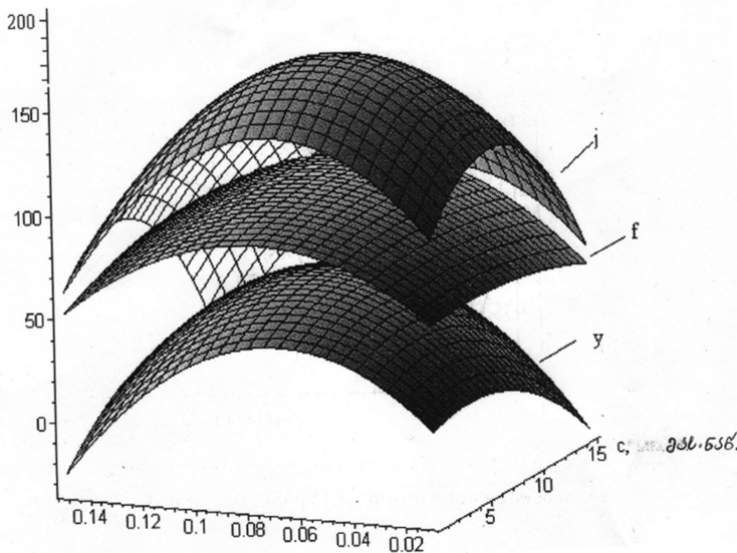
ვინილაცეტატის შემცველობა %

ნახ. 1. ლლობადი წებოს სიმტკიცის დამოკიდებულება კანიფოლის მოდიფიცირებულ ეთერებსა და სტაბილიზატორებზე: 1. ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერი; 2. K_1 -დანამატით; 3. K_2 -დანამატით; 4. K_3 -დანამატით; 5. K_4 -დანამატით; 6. K_5 -დანამატით; 7. სტაბილიზატორით CaO-6; 8. CaO-6-ით და K_4 -დანამატით; 9. CaO-6-ით და K_5 -დანამატით;

შემაჯავებლებს შორის ყველაზე მეტად გავრცელებულია სილიციუმის დიოქსიდი SiO_2 . ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერში აღნიშნული მასალის ოპტიმალური შემადგენლობის განსაზღვრისათვის გამოყენებული იქნა ექსპერიმენტის დაგეგმარების მათემატიკური მეთოდები, მიღებული იქნა შეწებების სიმტკიცეს, წებოსა და სილიციუმის დიოქსიდის რაოდენობას შორის დამოკიდებულების მათემატიკური მოდელის გრაფიკული სახე (ნახ.3).



ნახ.2. ლლობადი წებოს თერმოსტაბილურობის დამოკიდებულება კანიფოლის მოდიფიცირებულ ეთერებსა და სტაბილიზატორებზე: 1. ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერი; 2. სტაბილიზატორით CaO – 6; 3. CaO – 6-ით და K₄ – დანამატით; 4. CaO – 6-ით და K₅ – დანამატით.



ნახ.3. შეწებების სიმტკიცის დამოკიდებულება სილიციუმის დიოქსიდისა (C) და წებოს რაოდენობაზე (d): f-რეზინა CKC-30; y-რეზინა CKC-26; j-ფესსაცმლის საძირე ტყავი.

კვლევის შედეგებმა აჩვენა ნანოშემავსებლების გამოყენების პერსპექტიულობა, რადგან პოლიმერის შემადგენლობაში მათი მცირე რაოდენობით შეყვანაც კი (10%-მდე) საშუალებას იძლევა გაუმჯობესდეს წებოს ტექნოლოგიური თვისებები.

გარდა წებოს სიმტკიცისა და თერმოსტაბილურობისა შემოწმებული იქნა აგრეთვე წებოს ნაკერის წყლისადმი მდგრადობაც და დადგენილი იქნა, რომ წებოს საკვლევი კომპოზიციები ხასიათდება საკმაო წყალმედვობით.

ამრიგად, წებოს ნაკერის სიმტკიცის გამოცდამ განშრეგებაზე, თერმო- და წყალმედვობაზე აჩვენა ეთილენისა და ვინილაცეტატის თანაპოლიმერის შემადგენლობაში ნანონაწილაკების ეფექტურობა. ამ შემთხვევაში შეინიშნება არა მარტო სიმტკიცის, თერმო- და წყალმედვობის ზრდა, არამედ იზრდება აფსკის კოჰეზია, სტაბილურობა და სიცოცხლის ხანგრძლივობა, რაც დადებით მომენტს წარმოადგენს ძირის მიმაგრების პროცესში, აგრეთვე მცირდება კომპოზიციის თვითღირებულება.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. *Торосян Ю.В., Прохоров В.Т.* Нанотехнологии как путь обеспечения экологически безопасных технологических процессов при изготовлении изделий из кожи // Кожевенно-обувная промышленность, №5; М.-2010 г. –с. 20-21

GLUE COMPOSITION ON THE BASIS OF ETHYLENE AND VINYL-ACETIC ESTER COPOLYMERS WITH NANOTECHNOLOGY USE

M.Karkashadze, N.Lomtadze, Zh.Revishvili, L.Shanidze

*Kutaisi A.Tsereteli State University***SUMMARY**

In article research of physic-mechanical properties glue compositions on the basis of domestic copolymers of ethylene with vinyl-acetic ester is described. It is established that use of stabilizers provides heat stability CaO – 6 of glue composition not less than 8 hours. for improvement of adhesive properties of EVA copolymers glue compositions entered various types of modified air of rosin into structure, introduction of these additives increased also thermal stability and didn't lead to decrease in water resistance of composition. Results research show prospects of use of nanofillers as their introduction in a polymeric basis in rather small amounts allows not only to reduce prime cost of composition to 10% at the expense of reduction of quantity of components, but also to improve technological properties and as the rule, promotes preservation and even to some increase of durability of a polymeric material.

КЛЕЕВАЯ КОМПОЗИЦИЯ НА БАЗЕ СОПОЛИМЕРОВ ЭТИЛЕНА И ВИНИЛАЦЕТАТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОТЕХНОЛОГИИ

М.Каркашадзе, Н.Ломтадзе, Ж.Ревিশвили, Л.Шанидзе

*Кутаисский государственный университет им. А.Церетели***РЕЗЮМЕ**

В статье описано исследование физико-механических свойств клеевых композиций на основе отечественных сополимеров этилена с винилацетатом (ЭВА). Установлено, что использование стабилизаторов CaO – 6 обеспечивает термостабильность клеевой композиции не менее 8 часов. Для улучшения адгезионных свойств сополимеров ЭВА в состав клеевых композиций вводили различные типы модифицированных эфиров канифоли; введение этих добавок повысило также термостойкость и не привело к снижению водостойкости композиции. Результаты исследований показывают перспективность использования наноаппенителей, так как их введение в полимерную основу в сравнительно небольших количествах (до 10%) позволяет не только снизить себестоимость композиции за счет сокращения количества компонентов, но и улучшить технологические свойства и, как правило, способствует сохранению и даже некоторому повышению прочности полимерного материала.

ქიმიური ტექნოლოგია

რეზინოლური ოლიგომერის უმცველი პოლიმერული კომპოზიციების გადამუშავების ოპტიმალური პირობების დადგენა ფაქტორული ექსპერიმენტის ბიძი

ნუნუ მაისურაძე, ნორა დოხტურიშვილი, ნაზი გელაშვილი, ეთერ გავაშვილიძე, შალვა პაპავა, ვიტალი შეროზია, გივი პაპავა, რივა ლიპარტელიანი, ნანული ხოტენაშვილი
ევ. ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი

ფაქტორული ექსპერიმენტის გზით დადგენილია ძირითადი ტექნოლოგიური პარამეტრების ოპტიმალური მნიშვნელობები. პოლიმერულ კომპოზიციაში მატრიცად გამოყენებულია ბენზოლის ტიპის თერმორეაქტიული ოლიგომერი, შემავსებლად არამოდიფიცირებული დიატომიტი. დადგენილია გადამუშავების ოპტიმალური პირობები: ტემპერატურა - 180°C, ხვედრითი წნევა - 60მპა, დაყოვნების დრო - 40წთ ნაკეთობის 1მმ სისქეზე

სივრცითი სტრუქტურის მქონე თბო- და თერმომედეგ პოლიმერებს შორის თავისი პრაქტიკული მნიშვნელობით განსაკუთრებული ადგილი უკავიათ ფენოლ-ფორმალდეჰიდურ პოლიმერებს, რომლებსაც აქვთ მაღალი მექანიკური სიმტკიცე, დიელექტრიკული მაჩვენებლები, ქიმიური მედეგობა და სხვ.

ფენოლ-ფორმალდეჰიდური პოლიმერები გამოიყენებიან პოლიმერული კომპოზიციების სახით, რომელთა შემადგენლობაში უმნიშვნელოვანეს როლს ასრულებენ შემავსებლები.

მაღალი ხარისხით შევსებული თერმორეაქტიული პოლიმერების მისაღებად ჩვენს მიერ გამოყენებული იყო რეზოლის ტიპის ფენოლ-ფორმალდეჰიდური ოლიგომერები, რომლებიც მიღებული იყო ფენოლისა და ალდეჰიდის ურთირთომქმედებით, ხოლო შემავსებლად - არამოდიფიცირებული დიატომიტი.

შემავსებლის შემცველობა კომპოზიციაში შეადგენდა 30-80მას.%. კომპოზიციები გადამუშავებული იყო კომპრესიული დაწნეხვით, გახურებით.

პოლიმერული კომპოზიციების გადამუშავებისას საჭირო იყო დაგვედგინა ძირითადი ტექნოლოგიური პარამეტრების (ტემპერატურა, წნევა, დრო) ოპტიმალური მნიშვნელობები, რათა გადამუშავების შემდეგ მაქსიმალურად ყოფილიყო რეალიზებული პლასტიკური მასალის თვისებები, კერძოდ ის უპირატესობანი, რომელიც გააჩნია დიატომიტის შემცველ პლასტიკურ მასალებს (მაღალი თბო- და თერმომედეგობა, ფიზიკურ-მექანიკური და დიელექტრიკული თვისებები).

პოლიმერული კომპოზიციის გადამუშავებისათვის ოპტიმალური პირობების დადგენა შესაძლებელია ფაქტორული ექსპერიმენტის გზით, უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით (1-3). განმსაზღვრელ პარამეტრებად კომპოზიციის გადამუშავების დროს შერჩეული იყო ხვედრითი დარტყმითი სიბლანტე და მრღვევი ძაბვა ლუნვისას.

გადამუშავების პროცესზე, როგორც ცნობილია, გავლენას ახდენენ შემდეგი ძირითადი ფაქტორები: დაწნეხვის ტემპერატურა, ხვედრითი წნევა და ხანგრძლივობა. აღნიშნული პარამეტრები ჩვენს მიერ შერჩეული იყო როგორც დამოუკიდებელი ცვლადი მაჩვენებლები. ოპტიმიზაცია ისაზღვრებოდა სამი ფაქტორის - ტემპერატურის, წნევის და ხანგრძლივობის მიხედვით, რომლებიც გამოიყენებოდა ოთხ დონეზე: ტემპერატურა, °C-160, 170, 180, 190; წნევა, მპა - 40, 60, 80, 100; დაყოვნება წნევის პირობებში, წთ. - 4, 6, 8, 10. შედეგები მოცემულია ცხრილში I.

ცხრილი 1. დონეების ვარიების ფაქტორი

№	ფაქტორი	დონეები				შენიშვნა
		0	1	2	3	
1	ტემპერატურა, °C	160	170	180	190	ვარიების ინტერვალი 30°C, ბიჯი 10°C
2	დრო, წთი	4	6	8	10	ვარიების ინტერვალი 6წთ. ბიჯი 2 წთ
3	ხვედრითი წნევა, მპა	40	60	80	100	ვარიების ინტერვალი 60მპა, ბიჯი 20მპა

ყოველი ფაქტორის ვარიაცია ხდებოდა ოთხ ღონეზე. სულ ჩატარებულია 16 ცდა. ცდის პირობები მოცემულია ცხრილში 2. შედეგების დამუშავება მდგომარეობდა მიღებული პარამეტრების შეჯამებაში თითოეული ფაქტორისათვის ყოველ ღონეზე. ჯამის მაქსიმალური მნიშვნელობა საშუალებას გვაძლევდა გამოგვევლინა უმნიშვნელოვანესი ფაქტორი.

ცხრილში 3 მოცემულია მიღებული პლასტიკური მასალის ფიზიკურ-მექანიკური თვისებები.

ცხრილი 2. ექსპერიმენტის ჩატარების კოდი

№	ტემპერატურა, °C	დაყოვნების დრო, წთ.	ხვედრითი წნევა, მპა
1	0	0	0
2	1	1	1
3	2	2	2
4	3	3	3
5	1	2	3
6	0	3	2
7	3	0	1
8	2	1	0
9	2	3	1
10	3	2	0
11	0	1	3
12	1	0	2
13	3	1	2
14	2	0	3
15	1	3	0
16	0	2	1

ცხრილი 3. გადამუშავების პირობების გავლენა პლასტიკური მასალის თვისებებზე

ცდის №	გადამუშავების პირობები			პლასტიკური მასალის თვისებები	
	ტემპერატურა, °C	დაყოვნება, წთ.	ხვედრითი წნევა, მპა	ხვედრითი დარტყმითი სიბლანტე, კვ/მ ²	მრღვევი ძაბვა ლუნვაზე, მპა
1	160	4	40	6,1	60,0
2	170	6	60	6,2	75,0
3	180	8	80	8,0	70,0
4	190	10	100	5,5	67,7
5	170	8	100	3,5	70,0
6	160	10	80	6,1	56,5
7	190	4	60	7,7	88,8
8	180	6	40	6,1	90,8
9	180	10	60	7,1	90,1
10	190	8	40	3,0	80,6
11	160	6	100	2,5	60,0
12	170	4	80	3,3	70,5
13	190	6	80	5,5	60,5
14	180	4	100	5,8	74,5
15	170	10	40	7,1	75,8
16	160	8	60	7,8	90,5

ფაქტორული ანალიზი მდგომარეობს ყველა ღონეზე ცალკეული ფაქტორის მაჩვენებლის შეჯამებაში, რაც საშუალებას გვაძლევს გამოვავლინოთ განმსაზღვრელი ფაქტორი და ოპტიმალური ღონე გამოკვლეული მაჩვენებლისათვის. შედეგები მოცემულია ცხრილში 4.

როგორც ცხრილის მონაცემებიდან ჩანს, დარტყმით სიბლანტეზე არსებით გავლენას ახდენს გადამუშავების დროს ხვედრითი წნევა. უფრო მაღალი მაჩვენებლებით ხასიათდება 60 მპა ხვედრითი წნევის პირობებში გადამუშავებით მიღებული ნიმუში.

პლასტიკური მასალის თვისებებზე გავლენას ახდენს აგრეთვე გადამუშავების ტემპერატურა. მაღალი დარტყმითი სიბლანტით ხასიათდება 180°C-ზე გადამუშავებული ნიმუში. იგი ხასიათდება აგრეთვე ლუნვაზე მაღალი მრღვევი ძაბვით. გადამუშავებისას დრო ნაკლებ გავლენას ახდენს. მართალია 10 წუთით დაყოვნებისას მაქსიმალური შედეგი იყო მიღებული, მაგრამ ოპტიმალურად

უნდა ჩაითვალოს 4 წუთი, ვინაიდან დროში ასეთი დიდი განსხვავება არსებითად არ აუმჯობესებს პლასტიკური მასალის თვისებებს.

ამრიგად, ჩატარებული ექსპერიმენტის შედეგად დადგენილია გადამუშავების ტემპერატურა - 180°C, ხვედრითი წნევა -60მპა, დაყოვნების დრო -40 წთ, ნაკეთობის 1მმ სისქეზე.

ცხრილი 4.

ფაქტორები	ხვედრითი დარტყმითი სიბლანტე, კვ/მ ²	მრღვევი ძაბვა ლუნვაზე, მპა
გადამუშავების ტემპერატურა, °C		
160	22,5	267,0
170	20,3	291,3
180	27,0	325,4
190	21,7	297,6
დაყოვნების დრო, წთ		
4	23,1	293,8
6	20,3	286,3
8	22,3	311,1
10	25,8	290,1
ხვედრითი წნევა გადამუშავების დროს, მპა		
40	22,3	307,2
60	28,8	344,4
80	23,1	257,5
100	17,3	272,2

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. В.В.Налимов, Н.А.Чернова. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов, М.,1965, с. 42.
2. Справочник по пластическим массам. Под.ред. М.И.Гарбара, В.М. Катаева, М.С.Акутина. М., 1968, с.18.
3. Г.Ш.Папава, В.А.Шерозия, Г.Ш.Абашидзе, Ш.Р.Папава, Н.С.Гелашвили, М.Б.Гургенишвили, Н.З.Хотенашвили. Математическое моделирование технологии переработки полимерных композиций. საქ. მეცნ. აკადემიის “მოამბე”, 2005, ტ. 171, № 2, გვ. 286-289.

DETERMINATION OF OPTIMAL CONDITIONS FOR PROCESSING OF PESOL OLYGOMER CONTAINING POLYMER COMPOSITIONS BY FACTORIAL EXPERIMENT

Nunu Maisuradze, Nora Dokhturishvili, Nazi Gelashvili, Eteri Gavashelidze, Shalva Papava, Vitali Sherozia, Givi Papava, Riva Liparteliani, Nanuli Khotenashvili

Ivane Javakhishvili Tbilisi State Univesity, Petre Melikishvili Institye of Physical and Organic Chemistry

SUMMARY

Optimal values of the main technological parameters are determined by factorial experiment. Resol type thermoreactive oligomer (as a matrix) and popmodified diatomite (as a filler) are used in the polymer composition. Optimal conditions of processing are determined: temperatyre – 180°C, specific pressure – 60 mPa, retention time – 40 sec, per 1mm thickness of the the product.

УСТАНОВЛЕНИЕ ОРТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПЕРЕРАБОТКИ СОДЕРЖАЩИХ РЕЗОЛЬНЫЙ ОЛИГОМЕР ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПУТЁМ ФАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Н.А.Маисурадзе, Н.С.Дохтуришвили, Н.С.Гелашвили, Э.Ш.Гавашелидзе, Ш.Р.Папава, В.А.Шерозия, Г.Ш.Папава, Р.Г.Липартелиани, Н.З.Хотенашвили

Институт физической и органической химии им. П.Г. Меликишвили Тбилисского Государственного Университета им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

При переработке полимерных композиций, путём факторного эксперимента установлены оптимальные значения основных технологических параметров. В полимерной композиции в качестве матрицы использован терморективный олигомер (резольного типа), а наполнителем – немодифицированный диатомит (30-80мас.%). Определяющими параметрами при переработке композиции выбраны удельная ударная вязкость и разрушающее напряжение при изгибе. В результате эксперимента установлены оптимальные условия переработки: температура-180°C, удельное давление-60Мпа, время выдержки -40сек на 1мм толщины изделия.

რაფინირებული სილიციუმის მასალის გადამდგომის მეთოდით მიღება

ლენტი გაბრიჭიძე, ელზა ხუციშვილი, ნანა ქობულაშვილი, ნუნუ ხუციშვილი*,
თეიმურაზ გიგეტიშვილი, რამაზ ხარატი, გულნარა ურუშაძე, ნოდარ კეკელიძე
ფერდინანდ თავაძის მეტალურგიისა და მასალათმცოდნეობის ინსტიტუტი
elzakhutsishvili@yahoo.com

*საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

დამუშავებულია მეტალურგიული სილიციუმის შუალედური გაწმენდის, შედარებით იაფი, ეკოლოგიურად სუფთა ტექნოლოგია. ტექნიკური Si-ის რაფინირებისათვის ჩატარებულია მრავალჯერადი გადადნობა და დაყოვნება თხევად მდგომარეობაში. მეთოდი იძლევა საშუალებას მიღებულ იქნას "მზიური" Si-ის კრისტალების ამოწვევისათვის ვარგისი მასალა. დამუშავებული ტექნოლოგია დაფუძნებულია მინარეგების ხსნადობის სხვაობაზე წონასწორულ მდგომარეობაში მყოფ თხევად და მყარ სილიციუმის ფაზაში, მათი აქროლადობისა და სეგრეგაციის კოეფიციენტის განსხვავებაზე.

იმ ნახევარგამტარულ მასალებს შორის, რომელთა მეშვეობითაც განხორციელდა ძლიერი გარდატეხა კომუნიკაციურ და კომპიუტერულ სისტემებში, წამყვანი ადგილი უკავია სილიციუმს. როგორც კარგადაა ცნობილი Si არის ყველაზე გავრცელებული ელემენტი დედამიწაზე ჟანგბადის შემდეგ. სილიციუმი ხშირად გვხვდება დიოქსიდის სახით, რომელიც ბუნებაში გავრცელებულია ჩვეულებრივი ქვიშის, კვარცის, თიხის და სხვა მინერალის ფორმით. ამიტომ თავისთავად სილიციუმი არ არის ძვირი და შეიძლება ექსტრაჰირებული იქნას ქანიდან. კრისტალური Si-ის წარმოებისათვის საწყისი ნედლეულად გამოიყენება Si-ის დიოქსიდი (კაჟმიწა). მაგრამ სილიციუმის გამოყენებისათვის იგი პირველ რიგში უნდა გასუფთავდეს. ნახევარგამტარული ხელსაწყოების დასამზადებლად საჭიროა მაღალი სისუფთავის სილიციუმი. დიდმწარმოებლური ნახევარგამტარული მოწყობილობების თვისებები განისაზღვრება მათი მინარეგების მოშორების და პასივაციის ხარისხით.

სილიციუმის გასუფთავების ტექნოლოგიები საკმარისად რთული, შრომატევადი და ძვირადღირებულია, რაც განაპირობებს საბოლოო პროდუქტის მაღალ ფასს. ნახევარგამტარული სისუფთავის სილიციუმი გამოიყენება ძირითადად ორ სფეროში: მზის ენერგეტიკა და ელექტრონული მრეწველობა: მიკროელექტრონიკა (ინტეგრირებული სქემები), ოპტოელექტრონიკა, სენსორული ტექნიკა, პლაზმოქიმია, მზის მოდულები (თხელი ფენების ფუძეზე).

მზის ენერგეტიკაში სილიციუმი, დღეს და ახლო მომავალში, ძირითადი მასალაა ფოტო-გარდაქმნელების შესაქმნელად. მზის ელემენტი იქმნება კრისტალურ ე.წ. „მზიური“ ხარისხის სილიციუმის ფირფიტების ფუძეზე. იგი შესაძლოა შეიცავდეს ელექტრულად აქტიური მინარეგებს (Al, Fe, Ti, V, P) ჯამში 10^{-5} – 10^{-3} ატ%. „მზიური“ სილიციუმი ნაკლებად სუფთაა ვიდრე ელექტრონულ მრეწველობისათვის განკუთვნილი მაღალი სისუფთავის Si. „მზიური“ სილიციუმის ტექნოლოგიის დამუშავება და განვითარება ერთგვარი გასაღებია ქვეყნისათვის მნიშვნელოვანი დარგების ოპტოელექტრონიკის და მიკროელექტრონიკის განვითარებისათვის.

სილიციუმის გაწმენდის ეფექტური მეთოდების შერჩევა ხდება მისი კონკრეტული ფიზიკურ-ქიმიურ თვისებებიდან გამომდინარე. როგორც წესი, სუფთა ნივთიერება მიიღება მრავალსაფეხურიანი ტექნოლოგიური სქემებით, რომლებიც მოიცავენ ქიმიური და მეტალურგიული გაწმენდის მეთოდებს.

„მზიური ხარისხის“ სილიციუმი მიიღება პროცესში, რომელიც შედგება რამოდენიმე საფეხურისაგან: დაწყებული მისი აღდგენით სილიციუმის დიოქსიდიდან, რექტიფიკაციით, რაფინირებით და დამთავრებული მონოკრისტალის გაზრდით. მზის ელემენტებისათვის ვარგისი სილიციუმის მიღების ალტერნატიული ტექნოლოგიების განხილვისას, განსაკუთრებული ყურადღება უნდა მიექცეს შუალედური რაფინირებული სილიციუმის ხარისხის გაუმჯობესებას. ამიტომ აქტუალურია მეცნიერთა ძალისხმევა სილიციუმის წარმოების პროცესის ახალი ტექნოლოგიების დამუშავებაზე და არსებულის სრულყოფისაკენ, არა მარტო ტექნიკური (მეტალურგიული) სილიციუმის მიღებისათვის, არამედ განსაკუთრებით მისი შემდგომი რაფინირების პროცესისათვის. სწორედ შუალედურ პროცესს აქვს გადამწყვეტი მნიშვნელობა სასურველი სისუფთავის „მზიურ“ სილიციუმის მიღებისათვის.

წარმოდგენილი სამუშაოს ძირითადი მიზანია ეკოლოგიურად სუფთა მეთოდით, რაფინირებული სილიციუმის მიღება, რომელიც შემდგომში გამოიყენება მაღალი ექსპლუატაციური თვისებების მქონე “მზიური” სილიციუმის კრისტალების წარმოებისათვის.

ექსპერიმენტული ნაწილი

სამუშაოს ძირითადი ამოცანაა ჩატარდეს ტექნიკური სილიციუმის გაწმენდა მანე მინარეებისაგან მეტალურგიული (ტექნიკური) სილიციუმის დონიდან, ჩოხრაღსკის მეთოდით - “მზიური” Si-ის კრისტალების ამოწვევისათვის ვარგის დონემდე.

პოლიკრისტალური “მზიური ხარისხის” Si-ის მისაღებად გამოიყენება სხვადასხვა მეთოდები:

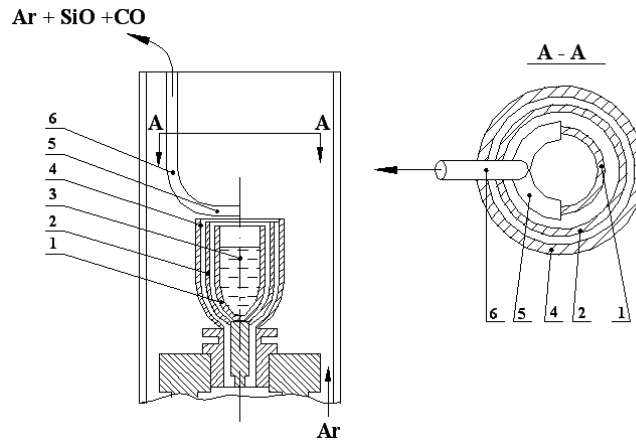
- ტრადიციული მეთოდი, დაფუძნებული მეტალურგიული Si-ის გადაყვანაზე ტრიქლორსილანის და მონოსილანის ფორმაში და მის შემდგომ გაწმენდაზე და აღდგენაზე (სიმენსის პროცესი);
- მეთოდი, დაფუძნებული მეტალურგიული Si-ის გაწმენდაზე ტრიქლორსილანის გამოყენების გარეშე;
- მეთოდი, დაფუძნებული Si-ის მიღებაზე სუფთა კვარციდან მისი აღდგენით და შემდგომი გაწმენდით.

ყველა შემთხვევაში სილიციუმის მიღების პირველი ეტაპია ნედლეული, რომელსაც წარმოადგენს მეტალურგიული სილიციუმი. აღნიშნული პროცესის რეალიზაციისათვის დასაწყისში იღებენ SiO_2 ქვიშის ან კვარცის სახით, რომელსაც რაკალურ ღუმელებში ადაღებენ კოქსით, დაახლოებით 1800°C -ის ტემპერატურაზე. მიღებული ტექნიკური სილიციუმი არის 98%-ის სისუფთავის. კვარცის ქვიშიდან კარბოთერმული მეთოდით აღდგენილი ტექნიკური სილიციუმი წარმოადგენს პოლიკრისტალური სტრუქტურის სილიციუმის ბლოკებს, რომელშიც ძირითადი მინარეებია ნახშირბადი. დანარჩენი შესაძლო სავარაუდო მინარეებია ზოგად შემთხვევაში: 2 % Fe, Al, Au, B, P, Ca, Cr, Cu, Mg, Mn, Mo, Ni, Ti, V, Zr. 98% Si ფართოდ გამოიყენება მეტალურგიულ მრეწველობაში. ტექნიკური სილიციუმის მიღების შემდეგ ხდება სილიციუმის გაწმენდა, ნახევარგამტარული სისუფთავის სილიციუმის მიღება და ბოლოს მისი სხმულის მრავალჯერ გადაკრისტალება და მონოკრისტალების მიღება. ზემოთ ჩამოთვლილი მეთოდებიდან მსოფლიოს მრეწველობაში ამჟამად ყველაზე გავრცელებულია სიმენსის პროცესი.

უნდა აღინიშნოს, რომ მიუხედავად იმისა, რომ სიმენსის მეთოდიკა არის გამართული და ფართოდ გავრცელებული პროცესი იგი ძვირად ღირებულია და ითხოვს ენერჯის დიდ ხარჯს. გარდა ამისა ტრიქლორსილანის გამოყენება შუალედურ ნედლეულად დაკავშირებულია წარმოების მნიშვნელოვან ეკოლოგიური რისკებთან. ამასთან დაკავშირებით არსებობს გარკვეული შეზღუდვები წარმოების განლაგების შესახებ დასახლებულ პუნქტებთან. სიმენსის-ტექნოლოგიის (რომელიც გამოიყენება უკვე 50წელი, ფასი 40 ევრო/კგ) ნაკლის ნიველირებისათვის პოლიკრისტალური Si-ის მისაღებად ხდება სხვადასხვა ალტერნატიული ტექნოლოგიების დამუშავება მრავალი წლის განმავლობაში [1-7]. ამ დროს ძირითადი უპირატესობა ენიჭება დროისა და ენერჯის ეკონომიას, ე.ი. საბოლოო პროდუქტის Si-ის თვითღირებულების შემცირების და კონკურენტუნარიანობის გაზრდას. ამ მიმართულებით მუშაობენ ისეთი კომპანიები როგორცაა MEMC USA (აშშ), REC (ნორვეგია), UCC, Wacker Chemie (გერმანია) და სხვა. იზრდება სხვა სპეციალური მეთოდების წვლილიც.

სამუშაოში შუალედურ პროცესად გამოყენებული იყო მეტალურგიული სილიციუმის მრავალ-ჯერადი გადადნობა და დაყოფა თხევად მდგომარეობაში. ნახევარგამტარ მასალების გადადნობა, როგორც განცალკავების და გასუფთავების მეთოდი შესაძლებელია გამოყენებულ იქნას ისეთი ნივთიერებებისთვის, რომლებიც ხასითდებიან საკმარისად დაბალი ორთქლის წნევით, როგორცაა სილიციუმი. გაწმენდის მეთოდის არსი დაფუძნებულია მინარეების ხსნადობის, აქროლადობის და სეგრეაციის კოეფიციენტის სხვაობაზე გარკვეულ ტემპერატურაზე წონასწორულ მდგომარეობაში მყოფ თხევად და მყარ ფაზებში. ტექნიკური ამოცანა მიმართული იყო 99.9% Si-ის სისუფთავის სილიციუმის მიღებაზე. საწყის მასალად შერჩეული იქნა KP-1 მარკის ტექნიკური სილიციუმი სილიციუმის 98 %-ით და 2% მინარეების ნაკრებით შემდეგი შემადგენლობით: Fe, Al, P, Ca, Cu, Mg, Mn, Ni, Ti. სურ.1-ზე გამოსახულია მეტალურგიული სილიციუმის გასუფთავების რეალიზაციის ტექნოლოგიური სქემა. სილიციუმის გასუფთავების ექსპერიმენტის ჩასატარებელი მოწყობილობა წარმოადგენს კამერას, სადაც მოთავსებულია კვარცის ტიგელი (1), გრაფიტის ქვესაღვამი (2), გრაფიტის მახურებელი (4), გაზგამწოვი მოწყობილობა (5), აირების გამოძევანი მილი (6). ტიგელში (1) იტვირთება მეტალურგიული სილიციუმი ნატეხების სახით ტიგელის

სრული მოცულობის შვესებით გაღობის (3) შემდეგ. სითხის სვეტის სიმაღლის შეფარდება ზედაპირის ფართთან ტოლია 0.4. შემდეგ კამერა იხურება და ამოიტუმბება 10^{-3} ტორ წნევამდე.



სურ. 1. სილიციუმის გასუფთავების ტექნოლოგიური სქემა
 1 – კვარცის ტიგელი, 2 – გრაფიტის ქვესაღვამი, 3 – ნაღობი, 4 – გრაფიტის მახურებელი,
 5 – გაზგამწოვი მოწყობილობა, 6 – აირების გამოძევანი ძილი

გაუწმენდავი ჩატვირთული სილიციუმი დნება კვარცის ტიგელში გრაფიტის გამახურებლით $1430-1500^{\circ}\text{C}$ ტემპერატურების ფარგლებში. შემდეგ სილიციუმის ნაღობი ყოვნდება ინერტული აირის წნევის ქვეშ 2-3 საათით. ინერტული აირის წნევის ქვეშ ნაღობის დაყოვნების მიზანია სილიციუმიდან წილის ზედა და ქვედა ფენების გამოყოფა. ტემპერატურის რეგულირებით $1430-1500^{\circ}\text{C}$ ფარგლებში, ერთდროულად ამოტუმბვით და არგონის წნევის ქვეშ (0.5ატმ) მინარევების ხსნადობის, აქროლადობის და სეგრეგაციის კოეფიციენტის განსხვავებულობის გამო სილიციუმში წონასწორულ მდგომარეობაში მყოფ თხევად ფაზაში ხდება კონტროლ-დაუქვემდებარებელი მინარევების წვეთების გამოყოფა და მათი ერთად შერწყმა ანუ კოაგულაცია. მინარევების ხსნადობისა და ხვედრითი წონის მიხედვით წიდა კონცენტრირდება კრისტალის ზედა და ქვედა ნაწილებში. ამ დროს ხდება ნაღობის გაყოფა სილიციუმის და წილის ფენებად. შემდეგ გამოირთვება მახურებელი კრისტალის სრულ გაცივებამდე. ნაღობი კვარცის ტიგელში გადადის მყარ მდგომარეობაში ნელი გაცივებით (2°C -ით წუთში) და ფორმირდება პოლიკრისტალური სილიციუმის სხმული. კრისტალის ამოღების შემდეგ ზედა და ქვედა წიდიანი ნაწილები იჭრება. დარჩენილი კრისტალი წინასწარი გაწმენდის შემდეგ კვლავ გადაიდნობა. სილიციუმის სისუფთავის დასადგენად გამოყენებულ იქნა ემისიურ-სპექტრალური ანალიზი გამოსხივების რკალური აგზნებით.

ექსპერიმენტის შედეგები და განხილვა

მეტალურგიული სილიციუმის შუალედური გაწმენდის შედეგები მოცემულია ცხრილში 1.

ცხრილი 1. სილიციუმის ექსპერიმენტული ნიმუშების მახასიათებლები

ქსპერიმენტული ნიმუშები	მინარევის შემადგენლობა, წონ%									ნაღობის $T \sim 1430-1500^{\circ}\text{C}$ -ზე დაყოვნების დრო, საათი
	Si	Al	Mg	Ca	Fe	Mn	Ni	Ti	Cu	
ეტალურგიული <i>n</i> -Si	98.30	0.40	0.02	~0.3	~0.5	0.04	0.02	0.15	0.003	
პირველად გადადნობილი <i>n</i> -Si	99.6	0.10			0.2	0.01	0.007	0.10	0.001	2
მეორედ გადადნობილი <i>p</i> -Si	99.9	0.012	0.001	0.004	0.01	0.002		0.10	0.001	5
მესამედ გადადნობილი <i>p</i> -Si	99.97	0.005	0.003	-	0.01	-	-	0.01	0.001	6

ცხრილიდან ჩანს, რომ უკვე პირველი გადადნობის შემდეგ სილიციუმი საგრძნობლად იწმენდება უმრავლესი მინარევიდან. მეორე გადადნობის ტექნიკური შედეგია – 98წონ% მეტალურგიული სილიციუმიდან 99.97წონ% პოლიკრისტალური სილიციუმის მიიღება და გამტარობის ტიპის შეცვლა *n*-ტიპიდან *p*-ტიპზე.

აქროლადი მინარეგები აქტიურად ორთქლებიან ნაღობის ზედაპირიდან. საწყის ეტაპზე დაბალ ტემპერატურებზე სილიციუმი იწმენდება იმ მინარეგების ნარევისაგან, რომლებიც უფრო აქროლადია ვიდრე ძირითადი კომპონენტი. დანადგარში წნევისა და ატმოსფეროს შემადგენლობის ცვლილებით რეგულირდება აქროლადი კომპონენტების შემადგენლობა. როცა სილიციუმი ხურდება ღუმელში ხდება იმ მინარეგების აორთქლება, რომელთა დნობის ტემპერატურა ნაკლებია სილიციუმის დნობის ტემპერატურაზე (1450°C). შემდგომ ეტაპზე ხორციელდება ტემპერატურის აწევა $50-70^{\circ}\text{C}$ -ით დნობის ტემპერატურის ზევით და ნაღობი ყოვნიანად გარკვეულ დროს (ცხრილი) უფრო ძნელდნობადი მინარეგების (რკინა, ტიტანი და სხვა) ასაორთქლებლად. მაღალი ტემპერატურის ზემოქმედებით დაბალი წნევის პირობებში ხდება აორთქლება იმ მინარეგებისა, რომელთა ორთქლის წნევა მეტია ვიდრე სილიციუმისა. ესენი არიან ფოსფორი, ალუმინი და სხვა.

დასკვნა

მეტალურგიული სილიციუმიდან ($98\% \text{Si}$) მიღებულია გაწმენდილი სილიციუმი $99.97\% \text{Si}$ -ის შემადგენლობით. სამ-ჯერ გადადნობით და ნაღობის დაყოვნებით დნობის ტემპერატურაზე და შემდეგ $50-70^{\circ}\text{C}$ -ით დნობის ტემპერატურის ზევით განხორციელდა მინარეგების აორთქლება და წიდაში გადაყვანა. გაწმენდის მეთოდი შუალედურია და გვაძლევს საშუალებას მივიღოთ რაფინირებული სილიციუმი, რომელიც შემდგომში გამოიყენება “მზიური” სილიციუმის კრისტალების წარმოებისათვის.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. T. Buonassisi, M. Heuer, A. A. Istratov, M. D. Pickett, M. A. Marcus, B. Lai, Z. Cai, S. M. Heald, E. R. Weber, *Acta Mater.* 2007, 55, 6119.
2. И.Е. Марончук, Э.С.Гудзь, О.В.Соловьёв, И.А.Хлопенова. Химия твердого тела и современные микро и нанотехнологии. VI Международная конференция. Кисловодск– Ставрополь: СевКавГТУ, 2006. 510 с.
3. Н.И.Кузакова, Н.В.Немчинова, Б.А.Красин. Современные проблемы науки и образования, 2007, №6, часть 3.
4. J. Queisser, E. E. Haller, *Science* 1998, 281, 945.
5. D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majumdar, H. J. Maris, R. Merlin, S. R. Phillpot, *J. Appl. Phys.* 2003, 93, 793.
6. პატენტი. 1857412 ЕПВ, МПК C01 B33/037 (2006.01). To-kumaru Shinji, Okazawa K., Kondo J. M. Okajima;– Nippon Steel Materials Co., Ltd. Tokyo 100-8071 (JP). – №067138156; 21.11.2007.
7. N.V.Nemchinova, S.S. Belsky, B.A. Krasin, High-purity metallurgical silicon as base element for solar energy // *European journal of Natural History, Materials of the conference «Climate and environment»*, Amsterdam, 21-23 april, 2006. – P. 95-96.
8. Ю.В.Реков, И.Ф.Червоный, С.Г.Егоров, О.А.Кисарин, Р.Н.Воляр *Восточно-Европейский журнал передовых технологий*. 2011, 3/5(51), с.15-19.

OBTAINING OF REFINED SILICON BY REMELTING METHOD

Leonti Gabrichidze, Elza Khutsishvili, Nana Kobulashvili, Nunu Khutsishvili*, Teimuraz Gigitashvili, Ramaz Kharati, Gulnara Urushadze, Nodar Kekelidze
Ferdinand Tavadze Institute of Metallurgy and Materials Science, 15 Kazbegi Str., 0160 Tbilisi, Georgia
 *Georgian Technical University

SUMMARY

It was worked out comparatively inexpensive ecologically pure technology of intermediate purifying of metallurgical – grade silicon. Multiple remelting and soaking in liquid state of metallurgical –grade silicon were applied for intermediate purifying process. The method gives an opportunity to receive preliminarily refined silicon for subsequent growth of “solar-grade” silicon by Czochralski pulling. The developing technology is based on the difference of solubility, volatility and segregation coefficient of shared components.

ПОЛУЧЕНИЕ ОЧИЩЕННОГО КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ПЕРЕПЛАВЛЕНИЯ

Леонти Габричидзе, Эльза Хуцишвили, Нана Кобулашвили, Нуну Хуцишвили*, Теймураз Гигиташвили, Рамаз Харати, Гулнара Урушадзе, Нодар Кекелидзе
Институт металлургии и материаловедения им. Фердинанда Тавадзе
 *Грузинский Технический Университет

РЕЗЮМЕ

Разработана относительно дешёвая, экологически чистая промежуточная технология очистки металлургического кремния. Для очистки кремния проведены многократные переплавки и выдержка расплава в жидком состоянии. Метод даёт возможность получить рафинированный кремний, годный для выращивания “солнечного” кремния. Разработанная технология основана на различии растворимости примесей в жидкой и твёрдой фазах кремния, различии в летучести и других свойствах разделяемых компонентов.

მცენარეული ნედლეულიდან სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქციის პრაქტიკული ასპექტები

მზია ციციავი, მარიამ ჩხაიძე, მირანდა ხაჩიძე, მანანა ბუზარიაშვილი,
ქეთევან ებრალიძე, ვლადიმერ ციციშვილი

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

სულ უფრო მკაცრი გარემოდაცვითი რეგულაციების გამო, სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქცია უკანასკნელ წლებში შეიძინა ფართო გამოყენება, როგორც ტრადიციული გამხსნელებით ორგანული ნაერთების ექსტრაქციის ალტერნატივამ. სტატიაში განხილულია სფე-ს გამოყენების ის პრაქტიკული გამოცდილება, რომელიც დაუგროვდა ამ დარგში მომუშავე მოწინავე ლაბორატორიებს და ჩვენს გუნდს. ვფიქრობთ ეს მიმოხილვა დაეხმარება იმ მეცნიერებს, რომლებსაც უნდათ გაერკვნენ და ჩაერთონ სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქციის ტექნოლოგიაში.

სუპერკრიტიკული ფლუიდი არის ნებისმიერი სუბსტანცია მის თერმოდინამიკურად კრიტიკულ წერტილზე მაღალ ტემპერატურასა და წნევაზე, სადაც მატერია არის კუმშვადი და იქცევა როგორც გაზი (ის ავსებს და იღებს კონტეინერის ფორმას), შესაბამისად ის არ არის სითხის მდგომარეობაში (არაკუმშვადია და იკავებს კონტეინერის ქვედა სივრცეს). ამასთან, სფე-ს აქვს სითხეებისათვის დამახასიათებელი სიმკვრივე და ზრდის მის გახსნის უნარს. ამიტომაც არ შეიძლება სუპერკრიტიკული ფლუიდი განიხილებოდეს, როგორც გაზი ან სითხე. სუპერკრიტიკული ფლუიდს აქვს უნიკალური უნარი აიაროს მსგავსად დიფუზირდეს მყარ სხეულებში და სითხის მსგავსად გახსნას ნივთიერებები, მას ადვილად შეუძლია შეიცვალოს სიმკვრივე ტემპერატურისა და წნევის მცირე ცვლილების გავლენით. ამ თვისებების გამო იგი გამოსადეგია ორგანული გამხსნელების შემცვლელად პროცესში, რომელსაც ეწოდება სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქცია (სფე) [1].

სფე ტექნიკის ძირითადი უპირატესობები

სფე-ს აქვს შედარებით დაბალი სიბლანტე და მაღალი დიფუზიის უნარი (სფე-ს დიფუზიურობა არის 10^{-4} სმ² წ⁻¹, ხოლო თხევადი გამხსნელისა 10^{-5} სმ² წ⁻¹), რაც განაპირობებს სუპერკრიტიკული ფლუიდის სწრაფ შეღწევადობას მყარი ნივთიერების ფორებში, რაც თავისთავად იწვევს ექსტრაქციის სიჩქარის გაზრდას. მაგალითად, თუ თხევადი გამხსნელით ექსტრაქციისთვის საჭიროა რამდენიმე საათი ან დღე, სფე-ს შემთხვევაში საკმარისია რამდენიმე ათეული წუთი.

სფე ექსტრაქციის დროს ფლუიდი უწყვეტი ნაკადით მოქმედებს ნიმუშზე და შესაბამისად შეუძლია უზრუნველყოს რაოდენობრივი ან სრული ექსტრაქცია.

სფე-ს პირობებში ფლუიდის ხსნადობის უნარის მანიპულირება შეიძლება წნევის (P) ან ტემპერატურის (T) ცვლილებით, რითაც მიიღწევა მნიშვნელოვნად მაღალი სელექტიურობა.

სუპერკრიტიკულ ფლუიდში გახსნილი ნივთიერებების გამოყოფა ადვილად შეიძლება წნევის შემცირებით. შესაბამისად, შესაძლებელი ხდება ნიმუშის კონცენტრირების პროცესის თავიდან აცილება, რომელიც ჩვეულებრივად დროს მოითხოვს, რაც ხშირად იწვევს აქროლადი კომპონენტების დანაკარგს.

სფე ჩვეულებრივად ტარდება დაბალ ტემპერატურებზე, რაც შესაძლებელს ხდის თერმულად ლაბილური ნაერთების შესწავლის და ახალი ასეთი ნაერთების აღმოჩენის შესაძლებლობას. სფე-ს შემთხვევაში შესაძლებელია თავიდან იქნას აცილებული ისეთი არასასურველი რეაქციები, როგორიცაა ჰიდროლიზი, დაჟანგვა, დეგრადაცია და გადაჯგუფება, რაც კლასიკური ექსტრაქციისა და ჰიდროლისტილაციის თანამდე პროცესებია.

სფე-ს შემთხვევაში შესაძლებელია მცირე რაოდენობით ნიმუშიდან ექსტრაქცია [2-4]. სფე თანაგამხსნელის სახით იყენებს (რამდენიმე მლ) ან საერთოდ არ იყენებს ორგანულ გამხსნელებს, მაშინ, როცა კლასიკური ექსტრაქციის დროს საჭიროა ათეული ან ასეული მლ გამხსნელი.

სფე შეიძლება პირდაპირ შეწყვილდეს ქრომატოგრაფიულ მეთოდთან, რაც მეტად მნიშვნელოვანია აქროლადი ნაერთების ექსტრაქციისა და რაოდენობრივი ანალიზისთვის.

სფე-ს შემთხვევაში მეტწილად შესაძლებელია ფლუიდის რეცირკულაცია ან ხელახლა გამოყენება.

სფე შეიძლება გამოყენებული იქნას სხვადასხვა მასშტაბის სისტემებში მაგ. ანალიზურ, პრეპარატულ, საცდელ და სამრეწველო მასშტაბით.

სფე-ში ხშირად გამოყენებული ფლუიდები და მოდიფიკატორები**ცხრილი 1.** ზოგიერთი გამხსნელის კრიტიკული წერტილები

გამხსნელი	კრიტ. ტემპ. °C	კრიტ.წნევა. ატმ	კრიტ.სიმკვ. გ/მლ
CO ₂	31.3	72.9	0.448
NH ₃	132.4	112.5	0.235
H ₂ O	374.15	218.3	0.315
Kr	-63.8	54.3	0.091
CH ₄	-82.1	45.8	0.2
C ₂ H ₆	32.28	48.1	0.203
C ₃ H ₈	96.67	41.9	0.217
CH ₃ O H	240.5	78.9	0.272

კრიტიკული მახასიათებლების გამო (31.3°C 72.9 ატმ.), სფე-ს მეთოდში ყველაზე ხშირად გამოიყენება CO₂. ის არატოქსიკურია, არააალებადი, მაღალი სისუფთავის და ხელმისაწვდომი დაბალი ფასის გამო. სუპერკრიტიკული CO₂ კარგი გამხსნელია არაპოლარული ნაერთებისთვის, კერძოდ, ნახშირწყალბადებისთვის, ამასთან, CO₂-ის დიდი კვადრუპოლური მომენტის გამო გართულებულია ისეთი საშუალო პოლარობის ნაერთების გახსნა, როგორცაა სპირტები, ეთერები, ალდეჰიდები და კეტონები. მცენარეებიდან პოლარული ნაერთების სფე წარმატებით ხდება ისეთი პოლარული ნივთიერებებით, როგორცაა ფრენ-22 და აზოტის ოქსიდი (N₂O). თუმცა მათი გამოყენება შეზრუდულია გარემოზე მავნე ზემოქმედების გამო.

წყალი, როგორც სფე მასალა უმთავრესად გამოიყენება სარეაქციო არის სახით. გადახურებულ წყალს (წყალი წნევის ქვეშ და 100°C-ზე ზემოთ, მაგრამ 374°C-ზე დაბლა) აქვს მაღალი საექსტრაქციო უნარი პოლარული ნაერთებისთვის, მაგრამ არახელსაყრელია თერმულად ლაბილური ნაერთებისათვის. ამასთან, თუ ჟანგბადი ზედმიწევნით არაა გასუფთავებული, წყალი მაღალ ტემპერატურაზე კოროზიულია და შეიძლება გამოიწვიოს სარეაქციო ჭურჭლის დაზიანება.

მოდიფიკატორების გამოყენება უმარტივესი, ამასთან ყველაზე ეფექტური გზაა CO₂ -ის ბაზაზე ფლუიდების სასურველი პოლარობის მისაღებად. მოდიფიკატორის შერჩევით, ან უბრალოდ კონცენტრაციის შეცვლით ადვილად შეიძლება ფლუიდების თვისებებით მანიპულირება. ზოგადად, მცირე რაოდენობა თხევადი მოდიფიკატორის დამატებამ შეიძლება მნიშვნელოვნად გაზარდოს ექსტრაქციის ეფექტურობა და შესაბამისად შეამციროს ექსტრაქციის დრო. თხევადი მოდიფიკატორების შერჩევა შესაძლებელია წინასწარი ექსპერიმენტების შედეგებზე დაყრდნობით. თანამხსნელის ტიპისა და თანაფარდობის ცვლილებით შესაძლებელია, როგორც სელექტურობის, ასევე მიზნობრივი პროდუქტის გამოსავლის გაზრდა [5,10,12].

ბუნებრივი ნაერთების სუპერკრიტიკული ექსტრაქციისათვის შესწავლილი იქნა სულ მცირე 17 მოდიფიკატორი. ყველაზე ეფექტური აღმოჩნდა მეთანოლი (იგი 20%-მდე ერევა CO₂-ს). ითვლება, რომ მეთანოლის მაღალი კონცენტრაცია აბრკოლებს კავშირს ხსნარსა და მცენარეულ მასალას შორის. ეთანოლი, მიუხედავად შედარებით დაბალი პოლარობისა, მეთანოლზე უკეთესი არჩევანი შეიძლება იყოს დაბალი ტოქსიკურობის გამო.

მაგალითად ყურძნის წიპწიდან ფენოლური ნაერთების ექსტრაქციისთვის ჩვენ უპირატესობა მოდიფიკატორად ეთანოლის გამოყენებას მივანიჭეთ. წინასწარმა ექსპერიმენტებმა გვიჩვენა, რომ მეთანოლი უკეთეს შედეგს იძლეოდა, ამიტომ პოლარობის გაზრდის მიზნით გამოვიყენეთ 96%-იანი ეთანოლი. 4% წყლის თანაობამ გაზარდა პოლიფენოლების გამოსავალი. წყლის პროცენტული მაჩვენებლის გაზრდამ გაზარდა ჯამური პოლიფენოლების გამოსავალი, თუმცა შეაცირა სელექტურობა. ბუნებრივი საკვები საღებავების (β-კაროტინისა და ლიკოპენის) ექსტრაქციისათვის აცეტონის გამოყენებამ მნიშვნელოვნად გაზარდა როგორც სელექტიურობა, ასევე გამოსავალი [13,14].

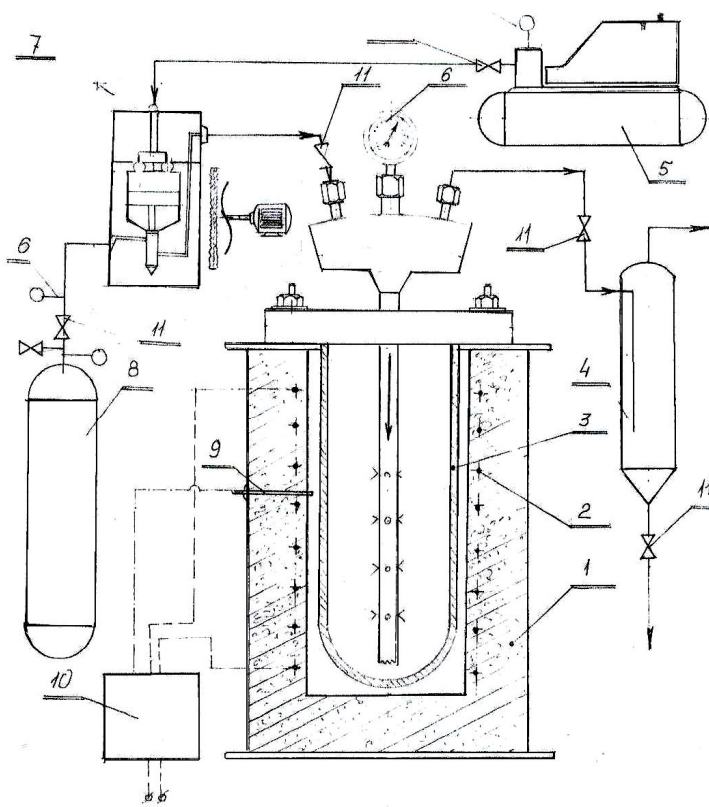
ეფექტურია სფე-ს საფეხურებრივი პროცესი, რომელიც პირველად პალმამ და თანამშრომლებმა განახორციელეს [5]. არაპოლარული ნაერთების ექსტრაქციისთვის პირველ ეტაპზე გამოიყენება სუფთა CO₂, ხოლო პოლარული ნაერთებისთვის მეორე ეტაპზე - თანამხსნელი. მაგალითად, ყურძნის წიპწიდან ზეთის ექსტრაქციისთვის გამოვიყენეთ CO₂. ხოლო პოლიფენოლების ექსტრაქციისთვის 96%-იანი ეთანოლი. დღეისათვის შესწავლის პროცესია ციტრუსების კანიდან ეთერზეთების და β-კაროტინის საფეხურებრივი ექსტრაქცია [14,15].

ნელ მცენარულ მასალაში ტენის არსებობა ჩვეულებრივ არასასურველია, განსაკუთრებით არაპოლარული ნაერთების სფე-ს დროს, როცა ექსტრაქცია სუფთა CO₂-ით ხდება. ექსტრაქციის ბოლო ეტაპზე წნევის შემცირება იწვევს ტემპერატურის მკვეთრ დაცემას, რის გამოც ხშირად ხდება მიღების დახშობა ყინულით. მაგრამ ზოგჯერ ტენი სასურველიც კი არის, რადგან როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, წყალმა შეიძლება სხვა თანაგამხსნელებთან ერთად მოდიფიკატორის როლი შეასრულოს.

არსებობს სფე სისტემაში თხევადი მოდიფიკატორის შეყვანის სამი გზა: დამატებითი ტუმბოს გამოყენება, საექსტრაქციო ცილინდრში თანაგამხსნელის წინასწარ მოთავსება და პირდაპირი ინექცია. პირველი გზა ძვირადღირებულია და ხშირად წარმოშობს მექანიკურ პრობლემებს, ამასთან პირდაპირი ინექციის მეთოდის გამოყენებისას საჭიროა სიფრთხილე და კონტროლი, რომ ბინარული ფლუიდი იმყოფება სუპერკრიტიკულ მდგომარეობაში [8]. ამასთან, დინამიური ექსტრაქციის დროს ხდება მოდიფიკატორის ძირითად ფლუიდთან ერთად (CO₂) გადმოღინება. ამიტომ, ჩვენ უპირატესობა თანაგამხსნელის წინასწარ მოთავსების მეთოდს მივანიჭეთ.

თხევადი მოდიფიკატორის გამოყენებისას აუცილებელია სტატიკური ექსტრაქცია, რადგან ის საშუალებას აძლევს გამხსნელს მოახდინოს ნიმუშის მატრიცის მოდიფიცირება. ნიმუშის შემადგენლობისა და ხსნარის კონცენტრაციის მიხედვით სტატიკური დრო მნიშვნელოვნად განსხვავდება და ძირითადად 5 დან 30 წუთამდე მერყეობს, თუმცა ცალკეულ შემთხვევაში სტატიკური დრო აუცილებელი არ არის. [7,13,14]

სფე-ს დანადგარის ზოგადი სქემა



1. ელექტროლუმენი;
2. ქრომნიკლის სპირალი;
3. ავტოკლავი;
4. სეპარატორი;
5. ჰაერის კომპრესორი;
6. მანომეტრი;
7. ტუმბოს მოდული;
8. CO₂-ის ბალონი;
9. თერმოწყვილი;
10. ტემპერატურის ელექტრონული რეგულატორი;
11. აირის ვენტილი

ავტოკლავი წარმოადგენს სფერული ძირის მქონე უჟანგავი ფოლადის ცილინდრულ ჭურჭელს სუფით, რომელსაც აქვს სამი გამანაწილებელი: ერთი CO₂-ის მისაწოდებლად, მეორე ექსტრაგირებული ნივთიერებების გამოსასვლელად და მესამე სტანდარტული მანომეტრისათვის. თავის მხივ ავტოკლავი მოთავსებულია გამათბობელში. რომელიც აღჭურვილია თერმოწყვილით. ავტოკლავში ტემპერატურის რეგულირება ხორციელდება ელექტრული რეგულატორის მეშვეობით. CO₂ ბალონიდან მიეწოდება მაღალი წნევის ტუმბოს მოდულს, რომელშიც ხდება მისი შეკუმშვა და გაცივება 20⁰C-მდე და ტუმბოს მეშვეობით მიეწოდება ავტოკლავს. რადიალური გამანაწილებლის მეშვეობით საექსტრაქციო ფენიდან

სუპერკრიტიკული პირობებში ხდება მიზნობრივი პროდუქტების ექსტრაგირება, რომელიც CO₂-თან ერთად მიემართება სეპარატორში, სადაც ხდება CO₂-ის განცალკევება მიზნობრივი პროდუქტისგან.

ექსტრაქციის პირობები

სფე ექსპერიმენტის წარმატებით ჩატარებისთვის საჭიროა ისეთი მნიშვნელოვანი ფაქტორების გათვალისწინება, როგორცაა: წნევა, ტემპერატურა, ნაკადის სიჩქარე და ექსტრაქციის დრო.

მცენარეებიდან ბუნებრივი ნაერთების ექსტრაქციის უმეტეს შემთხვევაში ხსნარების დიფუზია მატრიციდან წარმოადგენს მალიმიტირებელ საფეხურს.

მატრიციდან ნაერთების დიფუზიის სიჩქარეზე შეიძლება მოქმედებდეს სამი ფაქტორი: სფე მოლეკულების განაწილება მატრიცაში, რამაც შეიძლება შეამციროს თანაგამხსნელის შეღწევადობა; თანაგამხსნელის ხსნადობა სუპერკრიტიკულ ფლუილში, რაც პიდაპირ კავშირშია ფლუიდის სიმკვრივესთან და ტემპერატურის ფაქტორი, რამაც შეიძლება ზეგავლენა მოახდინოს განსაკუთრებით მაღალი დუდილის ტემპერატურის თანაგამხსნელზე.

სფე ექსტრაქციის მთავარი განმსაზღვრელი ფაქტორია მიზნობრივი ნაერთების ხსნადობა სფე-ში. ხსნადობა კონტროლდება ორი ფაქტორით და ნივთიერების აქროლადობით, რაც ტემპერატურის ფუნქციაა და სფე გამხსნელის ხსნადობის ეფექტით, რაც ფლუიდის სიმკვრივის ფუნქციაა. ჰიდროქსილის ჯგუფებმა შეიძლება ზემოქმედება მოახდინოს ხსნარის აქროლადობაზე, რაც განსაზღვრავს სუპერკრიტიკული CO₂-ით ექსტრაქციის უნარს. ფენერის და კოლ. [13]ის მიხედვით პაპრიკიდან β-კაროტინის სფე ექსტრაქციის დროს, წნევის დაწვევამ 338-დან 250 ატმ-მდე, რასაც მოყვა ფლუიდის სიმკვრივის შემცირება, გამოიწვია ექსტრაქციის ეფექტურობის მკვეთრი შემცირება. თუმცა, ექსტრაქციის დროის გაზრდით მიიღებოდა დამაკმაყოფილებელი გამოსავალი. ხშირად სასურველია, რომ ნიმუშის ექსტრაქცია მოხდეს ზუსტად იმ წერტილის ზემოთ, როცა მიზნობრივი ნაერთები ხდებიან ფლუილში ხსნადები, ასე, რომ შესაძლებელი ხდება სხვა ნაერთების ექსტრაქციის მინიმუმამდე დაყვანა. სფე-ს პროცესის სელექტურობის მისაღწევად მნიშვნელოვანია ფლუიდის სიმკვრივის ზედმიწევნით კონტროლი. ფლუიდის სიმკვრივის კონტროლით შეიძლება ასევე მიღწეული იქნას ექსტრაქციის ფრაქციონირება. თუ მიზნობრივი ნაერთები არააქროლადია, შეიძლება საჭირო გახდეს CO₂-ის უფრო მაღალი სიმკვრივე.

ამას გარდა, გამშრობი აგენტის სახით სილიკაგელის ან გაუწყლოებული ნატრიუმის სულფატის გამოყენება სფე ტექნოლოგიასთან შეწყვილებით შესაძლებელს ხდის სრული ექსტრაქციის შერჩევითობის გაუმჯობესებას და ამავე დროს ამცირებს ორგანულ მასალაში ტენის მაღალი შემცველობის გამო გაჭედვის პრობლემას. საექსტრაქციო ნაერთების დალექვის და შესაბამისად გაჭედვის თავიდან ასაცილებლად ასევე ეფექტურია რესტრიქტორის გათბობა სათანადო ტემპერატურამდე [7].

ორგანული ნაერთების ხსნადობის გასაზრდელად უადვილესი, მაგრამ ეფექტური მეთოდია მაღალი კონცენტრაციის თხევადი მოდიფიკატორის გამოყენება, ისინი ადვილად გადმოედინებიან მიმღებ ჭურჭელში, ამასთან, საჭიროა CO₂-ის სიმკვრივის ზედმიწევნით კონტროლი, რადგან მაღალი სიმკვრივის CO₂-მა შეიძლება გამოიწვიოს დიდი რაოდენობით ტრიგლიცერიდების ექსტრაქცია, რაც ასევე შეიძლება გაჭედვის მიზეზი დახდეს.

მნიშვნელოვანია ასევე მინის ან კერამიკის ბურთულების, როგორც ნეიტრალური შემავსებლის გამოყენება, რაც ზრდის როგორც სუპერკრიტიკული ფლუიდის, ასევე მოდიფიკატორის შეხების ზედაპირის გაზრდას საექსტრაქციო ნიმუშთან და ამცირებს მკვდარი მოცულობის ეფექტს [7-12].

ნიმუშის მომზადება

მნიშვნელოვანია ასევე საექსტრაქციო ნიმუშის მომზადება. ბუნებრივი ნაერთების სფე დროს ხშირად გამოიყენება ნედლი მცენარეული მასალა. თუ სასურველი ნაერთები აქროლადი, არამდგრადი ან ლაბილურია, ნედლი მასალის ექსტრაგირებისას როგორც უკვე აღვნიშნეთ, მაღალმა ტენიანობამ შეიძლება შექმნას მექანიკური დაბრკოლება დანადგარის მილებში ყინულის საცობის სახით. ამდენად, ნიმუშში გაუწყლოებული Na₂SO₄ შერევამ შეიძლება მოგვცეს ისეთივე ეფექტი, როგორც ნეიტრალურმა შემავსებელმა. ზოგიერთ შემთხვევაში სფე-თვის უკეთესია მშრალი მასალის გამოყენება. თავისთავად, მცენარეული მასალის გაშრობის პროცედურა მნიშვნელოვან გავლენას ახდენს ექსტრაქტების გამოსავალსა და თვისებებზე [15].

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Supercritical fluid and supercritical fluid extraction. Thermodynamics research laboratory. Department of chemical engineering.

2. Mehdi Ashraf-Khorassani and Thomas Taylor. Sequential fractionation of grape seeds into oils. Polyphenols, and procyanidins via a single system employing CO₂- based fluids. J.Agric.Food Chem. 2004, 52, 2440-2444
3. Revercon E. Fractional separation of SCF extracts from marjoram leaves; mass transfer and optimization. J. Super. Fluid 1992. 5. pp. 256-261
4. Dron A. Guyer. D.E. Gage D.A. and Lira. Yield and quality of onion flavor oil obtained by SFE and other method . J. Food Eng. 20. 107-124
5. Palma, M.; Taylor, L.T. Extraction of polyphenolic compounds from grape seed using near critical carbon dioxide. J. Chromatography. A 1999, 849, 117
6. Lili Xu, Xiaori Zhan, Zhaowu Zeng, Rong Chen & col. Recent advance supercritical fluid extraction of essential oils. African Journal of pharmacy and pharmacology vol. 5 (9) pp. 1196-1211, 2011
7. Qingyong Lang, Chien M. Wai. Supercritical fluid extraction in herbal and natural product studies- a practical review Talanta 53 (2001) 771-782
8. Molero, A.; Pereyra, C.; de la Ossa, E.M. Recovery of grape seed oil by liquid and supercritical carbon dioxide extraction: A comparison with conventional solvent extraction. Chem. Eng. J. 1996, 61, 227-231
9. Baysal T., Ersus S. and Starmans D. Supercritical CO₂ extraction of β -carotene and lycopene from tomato paste waste. J. Agric. Food Chem. 2000, 48, 5507-5511.
10. Facundo Mattea, Angel Martin, Maria Jose Cocero. Carotenoid processing with supercritical fluid. Journal of food engineering 93, 2009. 255-265
11. Omprakash H. Nautiyal, Krishan Kant Tiwari. Supercritical carbon dioxide extraction of Indian orange peel oil and hydro distillation comparison on their composition. Science and technology 2012, 2(3) 27-31
12. M.C. Pascual- Marti, A. Salvador, A. Chafer, A. berna . Supercritical fluid extraction of resveratrol from skin of Vitis vinifera and determination by HPLC Talanta 54 2001. 735- 740
13. Manuel Jaren- Galan Uwe Nienaber. Paprika oleoresin extraction with supercritical carbon dioxide. J. Agric. Food . Chem 1999 47 3558-3564
14. მ. ჩხაიძე, ქ. ებრალიძე, მ. ციციავი, მ. ხაჩიძე ნ. ჩაგანავა. პოლიფენოლის კანიდან ბუნებრივი საკვები საღებავების ექსტრაქცია სუპერკრიტიკული ფლუიდებით. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია 2012 ტ. 38 №2-3 გვ. 262-264
15. მ.ჩხაიძე, მ.ხაჩიძე, ი.ჯინიფაშვილი, ა.კირიაკიდი, მ.ციციავი. ანტიოქსიდანტური პოლიფენოლების მიღება ყურძნის წიპწიდან ეთანოლი/წყლით მოდიფიცირებული სუპერკრიტიკული CO₂-ის გამოყენებით საქ. მეცნ. ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2008, ტ.34, №3 გვ. 275-278.
16. მ.ციციავი, ქ.ებრალიძე, მ.ჩხაიძე, მ.ხაჩიძე, თ.უჩანეიშვილი. ღვინის წარმოების ნარჩენის შრობის დინამიკა. საქ. მეცნ. ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2010, ტ.36, №3: გვ. 149-152.

PRACTICAL ASPECTS OF SUPERCRITICAL FLUID EXTRACTION FROM PLANT RAW MATERIAL

Mzia Tsitsagi, Mariam Chkhaidze, Miranda Khachidze, Manana Buzariashvili,
Ketevan Ebralidze, Vladimer Tsitsishvili

Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry

SUMMARY

Due to increasingly stringent environmental regulations, supercritical fluid extraction has gained wide acceptance in recent years as an alternative to conventional solvent extraction for separation of organic compounds. This article presents the practical experience of leading laboratories and our team in this research area. It is hoped that this review may help scientists who are interested in understanding and involving in supercritical fluid extraction technology.

ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЭКСТРАКЦИИ СУПЕРКРИТИЧЕСКИМИ ФЛЮИДАМИ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

М.В.Цицаги, М.Ш.Чхаидзе, М.М.Хачидзе, М.С.Бузариашвили, К.Г.Ебралидзе, В.Г.Цицишвили
*Институт физической и органической химии им.П.Г.Меликишвили
Тбилисского государственного университета им.Ив.Джавახишвили*

РЕЗЮМЕ

В последние годы строгие природоохранные регуляции стимулировали широкое использование экстракции суперкритическими флюидами (ЭСФ) в качестве альтернативы экстракции органических соединений традиционными растворителями. В статье рассмотрен практический опыт использования ЭСФ, накопленный передовыми лабораториями, работающими в этой области, а также нашей группой. Надо полагать, этот обзор поможет исследователям, заинтересованным в технологиях ЭСФ.

თეთრი ფერის ცეოლითური შემავსებლის მიღება შემფუთავი ქაღალდის წარმოებისთვის

ვლადიმერ ციციშვილი, ნანული დოლაბერიძე, ნატო მირძევილი, მანანა ნიჟარაძე

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

თეთრი ფერის კლინოპტილოლიტის, ქაღალდის წარმოებაში გამოყენების მიზნით, შესწავლილია საქართველოს ადგილმდებარეობის რკონის უბნის კლინოპტილოლიტშემცველი ქანის ქიმიური შედგენილობის ცვლილება სხვადასხვა კონცენტრაციის მჟავებისა და ტუტის ურთიერთქმედებისას. გამოვლენილია გათეთრების ხარისხის დამოკიდებულება ქიმიური შედგენილობის ცვლილებაზე. დადგენილია გათეთრების პროცესის ოპტიმალური პირობები.

ბოლო წლებში, როგორც განვითარებულ, ისე განვითარებად ქვეყნებში (ინდონეზია, მალაიზია) დაიწყო ბუნებრივი ცეოლითების, უმეტესად კლინოპტილოლიტის სხვადასხვა ფორმების გამოყენება ქაღალდის წარმოებაში. დადგენილია წვრილდისპერსული ცეოლითების (დაახლოებით 10 მკრ-მდე), როგორც შემავსებლის გამოყენების შესაძლებლობა ქაღალდისა და მუყაოს წარმოებაში [1]. ასეთი შემავსებლიანი ქაღალდის მოხმარება აქტუალურია კვების პროდუქტების, ბოსტნეულისა და ხილის შესანახად. მაგალითად ბოსტნეული პროდუქტების შენახვისას ჩატარებულმა ცდებმა აჩვენა, რომ უმჯობესდება ტომატისა და წიწკის შენახვისუნარიანობა. სასურველი მიკროკლიმატის შექმნის პირობებში შეფუთული ნაყოფი ინარჩუნებს ტენშემცველობას, დაცულია გამოშრობისაგან. კონტროლთან შედარებით უმჯობესდება ორგანოლექტიკური მაჩვენებლები. დანაკარგი მცირდება 1,7-2,1-ჯერ. ასევე რეკომენდირებულია ასეთი ქაღალდის გამოყენება იმ საგნების შესანახადაც, რომლებიც ტენისადმი მაღალი მგრძობელობით გამოირჩევიან (ზუსტი საზომი ხელსაწყოები, ელექტროტექნიკა და სხვა).

ქაღალდის წარმოების პროცესში ZeovitTM-გან მიღებული შემავსებლის ჩართვა საშუალებას იძლევა მომზადდეს ქაღალდი, რომელიც სუნთქავს, სპობს არასასიამოვნო სუნებს [2], იცავს ობისგან, აუმჯობესებს კვების პროდუქტების შენახვისუნარიანობას, ახანგრძლივებს შენახვის ვადას, ზრდის გამძლეობას სხვადასხვა დაავადებების მიმართ, ნაკლებია ბუნებრივი დანაკარგები [3]. ეს კი განპირობებულია კლინოპტილოლიტის იონმიმოცვლითი, ადსორბციული და მოლეკულურ-საცრული თვისებებით [4,5]; ამავე თვისებების გამო, ცეოლითურმა შემავსებელმა დიდი გამოყენება შეიძლება ჰპოვოს ქაღალდის დამზადების საქმეში, რომელიც გამოსადეგი იქნება თამბაქოს ბოლის მეორადი შთანთქმისათვის [6].

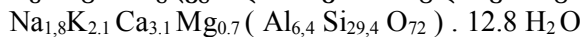
ცეოლითების უნიკალურ თვისებაზე ასევე დაფუძნებული ბაქტერიოციდული ქაღალდის შექმნის შესაძლებლობა, რომელიც შპალერადაც გამოიყენება. ამ შემთხვევაში, ცეოლითებში შეყვანილია ბაქტერიოციდული თვისებების მატარებელი კატიონები: Ag^+ , Cu^{2+} , Zn^{2+} და სხვა [7].

იაპონიაში საწარმოო პროცესებში გამოყენებული ცეოლითების 47-49% ქაღალდის წარმოების წილზე მოდის. იგი გამოიყენება, როგორც ქაღალდისა და მუყაოს შემავსებელი. ქაღალდის მასის შესავსებად 10 მკრ-მდე ცეოლითის ფრაქციის გამოყენება, უფრო მკვირივი, ადვილად ჭრადი ქაღალდის მიღების შესაძლებლობას იძლევა. ასეთი ქაღალდის ცვეთა 3%-ზე ნაკლებია. შესაძლებელია უფრო მსუბუქი ქაღალდის წარმოებაც კლასიკურთან შედარებით, თუ ცეოლითის დანამატი 28%-მდე იქნება [8].

შემავსებლის სახით გამოიყენება თეთრი ფერის მაღალი ხარისხის ცეოლითი, რისი მიღწევაც ქიმიური მეთოდების გამოყენებით არის შესაძლებელი, სახელდობრ, ცეოლითის მჟავით დამუშავებით შესაძლებელია პროდუქტის სითეთრე 8%-ით გავზარდოთ.

ცეოლითების მოდიფიცირების პრაქტიკაში ფართოდ გამოიყენება მჟავით დამუშავების მეთოდი, რომელიც მნიშვნელოვნად აუმჯობესებს მათ შთანთქმითუნარიანობას [9] და მათეთრებელ თვისებებს [10]. ასეთი სახის ცეოლითური შემავსებლის დანამატად ქაღალდის წარმოებაში გამოიყენება აპირობებს თეთრი ფერის, ჰაერგამტარი, შემფუთავი ქაღალდის მიღებას.

სამუშაო ითვალისწინებდა შემფუთავი ქაღალდის მისაღებად თეთრი ფერის ცეოლითური შემავსებლის მიღების მეთოდის შემუშავებას ქიმიური დამუშავების გზით. კვლევაში ამ მიზნით გამოყენებული იყო საქართველოს ადგილობრივი კლინობტილოლიტ-შემცველი ქანი ახლადმიკვლეული რკონის უბნიდან – CtR. რენტგენულ-დიფრაქტომეტრული მეთოდით კვლევის შედეგად დადგენილია ნიმუშის მინერალოგიური შედგენილობა (90%-ცეოლითური ფაზა, ძირითადი მინარევით მიკროფაუნა). ატომურ-აბსორბციული მეთოდით ჩატარებული ელემენტარული ანალიზის შედეგად დადგენილია ნიმუშის ქიმიური შედგენილობა, გამოსახული ფორმულით:



სხვა ფიზიკურ-ქიმიური მახასიათებლები მოცემულია შრომაში [9].

CtR-ის მომზადების I ეტაპი მისი ფაიფურის როდინში დაწვრილმანება, ფრაქციონირება და საცერი გატარებაა. ლაბორატორიულ პირობებში გამოიყენებოდა საცერი 63μ ნახვრეტებით. ფხვნილის სახის წვრილდისპერსული მასალა ირეცხებოდა გამოხდილი წყლით.

კლინობტილოლიტის გათეთრების მიზნით, მისი ქიმიური დამუშავება ხორციელდებოდა სხვადასხვა სახისა და კონცენტრაციის მჟავებითა და ტუტით.

გამოიყენებოდა ძმარმჟავა CH₃COOH და მარილმჟავა HCl (0,25-დან, 5,0-მდე, 6); მჟაუნმჟავა C₂H₂O₄ (1,06) და ნატრიუმის ჰიდროქსიდი NaOH (0,1; 0,5; 1; 2,5; 36). დამუშავების ტემპერატურა 98-100⁰C (წყლის აბაზანა), ხანგრძლივობა 4სთ; თანაფარდობა მყარ ფაზასა და ხსნარს შორის 1:10. დამუშავებული მასალა ირეცხებოდა გამოხდილი წყლით (HCl-ის შემთხვევაში), Cl⁻იონების არყოფნამდე, რომელიც მოწმდებოდა ვერცხლის ნიტრატის ხსნარით; მჟაუნმჟავას და ძმარმჟავას შემთხვევაში, ირეცხებოდა pH=7-მდე. მასალა შრებოდა, ჯერ ოთახის ტემპერატურაზე, შემდეგ თერმოსტატში, 100-105 C-ზე ერთი საათის განმავლობაში. მიღებული ნიმუშები მოწმდებოდა კრისტალური სტრუქტურის შენარჩუნებაზე რენტგენულ-დიფრაქტომეტრული მეთოდით. სრული ქიმიური ანალიზის საფუძველზე მიღებული შედეგების მიხედვით, ექსპერიმენტის აღნიშნულ პირობებში კლინობტილოლიტის HCl-ის სხვადასხვა კონცენტრაციის ხსნარით დამუშავებისას შეინიშნება სილიკატური მოდულის (Si/Al) ზრდა 4,6-დან 22,95-მდე (ცხრ. 1).

ცხრილი 1. ცვლილება კლინობტილოლიტის ელ. უჯრედში სხვადასხვა კონცენტრაციის მარილმჟავასა და ძმარმჟავას ხსნარების ურთიერთქმედებისას

HCl კონც., 6	Si	Al	Si/Al	CH ₃ COOH კონც., 6	Si	Al	Si/Al
-	29,4	6,4	4,59	-	29,4	6,4	4,59
0.25	30,34	6,01	5,05	0.25	30,05	5,85	5,14
0.50	31,44	5,25	5,95	0.50	30,63	5,02	6,10
1.00	32,02	4,85	6,60	1.00	31,26	4,43	7,06
2.00	32,75	3,25	10,08	2.00	31,75	4,03	7,88
5.00	33,05	1,44	22,95	5.00	32,05	4,00	8,01

შეინიშნება ასევე კლინობტილოლიტის ძირითადი კატიონის კალციუმის ცვლილება მარილმჟავას 16. კონცენტრაციამდე გაზრდისას. მჟავას კონცენტრაციის შემდგომი ზრდა ამ კატიონების შემცველობას პრაქტიკულად არ ცვლის, რაც ალბათ იმით აიხსნება, რომ ცეოლითებში 2-ვალენტური კალციუმის კატიონები, ერთვალენტური კატიონებთან შედარებით ძნელად ჩაინაცვლებიან წყალბადით. ეს მოსაზრება ვრცელდება მაგნიუმის კატიონებზეც. (ცხრ. 2).

ცხრილი 2. კლინობტილოლიტის დეკატიონირება

HCl კონც., 6.	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺	K ⁺
0.25	4,11	0,70	2,70	2,11
0.50	3,86	0,51	2,21	1,42
1.00	0,91	0,45	1,43	0,85
2.00	0,98	0,34	0,24	0,55
5.00	0,99	0,35	0,18	0,45

ცხრილი 1-ის მონაცემების შედარებისას, გამოვლინდა, რომ CtR-ის ძმარმჟავას 5ნ. ხსნარით დამუშავებისას, დეალუმინირების ხარისხი უფრო დაბალია, ვიდრე ამავე კონცენტრაციის მარილმჟავას ხსნარით დამუშავების შემთხვევაში, რაც პირდაპირაა დაკავშირებული კლინოპტილოლიტის ფერის ცვლასთან გათეთრების მიმართულებით. კლინოპტილოლიტზე ნატრიუმის ტუტის ურთიერთქმედება ხორციელდებოდა იმავე პირობებში, რაც მჟავების დროს. NaOH-ის კონცენტრაცია იცვლებოდა 0,01-დან 3 ნ.-მდე. რენტგენულ-დიფრაქტომეტრული და ქიმიური ანალიზის მეთოდებით კვლევის შედეგად დადგინდა, რომ სანტინორმალური ხსნარის გამოყენებას არ მიეყვართ მნიშვნელოვან ცვლილებამდე კლინოპტილოლიტის სტრუქტურაში. 0,1; 0,5; 1ნ. ხსნარების მოხმარებისას ადგილი აქვს დეალუმინირებას; 2,5ნ. NaOH-ის ხსნარით დამუშავებისას, ცეოლითი ამორფიზირდება; 3ნ. NaOH-თან ურთიერთქმედება კი იწვევს ახალი ცეოლითური ფაზის წარმოქმნას. მინერალის 0,16-დან 0,5ნ. ნატრიუმის ტუტით დამუშავების პროცესი შეიძლება დახასიათდეს, როგორც Ca²⁺-ის კატიონების Na⁺ კატიონებით ჩანაცვლების პროცესი (ცხრ. 3,4)

ცხრილი 3. CtR-ის ქიმიური შედგენილობის ცვლილება სხვადასხვა კონცენტრაციის NaOH-ის ხსნარით დამუშავებისას

კომპონენტი	NaOH-ის კონცენტრაცია, ნ.	
	0.5	1.0
Si	31.21	28.48
Al	6.19	5.89
Na	4.85	5.43
K	0.72	0.51
Ca	1.05	0.62
Mg	0.37	0.23

კლინოპტილოლიტის გათეთრების პროცესში მჟაუნმჟავას სუსტი ხსნარის ჩართვამ არ გამოიწვია ცეოლიტის შემადგენლობაში ცვლილება. მიღებული შედეგები საშუალებას გვაძლევს დავადგინოთ კლინოპტილოლიტის გამოყენების ზღვრები მჟავა და ტუტე რეაგენტებთან ურთიერთქმედებისას, გამოვავლინოთ ცვლილებები დეალუმინირებისა და დეკატიონირების სახით. აქედან გამომდინარე, განვსაზღვროთ, გათეთრების ოპტიმალური პირობები.

ცხრილი 4. ბუნებრივი კლინოპტილოლიტის გათეთრების პროცესის პირობები

მათეთრებელი ნივთიერებები და მათი მახასიათებლები			მათეთრების პროცესში მიმდინარე ცვლილებები
მათეთრებელი ნივთიერება	მოლეკულური წონა, გ	კონცენტრაცია	
მჟაუნმჟავა C ₂ H ₂ O ₄	90	1,0	ცეოლიტის შემადგენლობა უცვლელია, არ ხდება დეკატიონირება, დეალუმინირება
ძმარმჟავა CH ₃ COOH	60	0,1 0,25	არ ხდება დეალუმინირება; მიმდინარეობს დეკატიონირება
მარილმჟავა HCl	36,5	0,1	ცეოლითი პრაქტიკულად ინარჩუნებს პირვანდელ შედგენილობას
		2,0 5,0	ღრმა დეალუმინირება, შტრუქტურა შენარჩუნებულია
ნატრიუმის ჰიდროქსიდი NaOH	40	0,01	ცეოლიტის შედგენილობა უცვლელია
		0,1	მიმდინარეობს დეალუმინირების პროცესი
		0,5	
		1,0	
		2,5	ცეოლითი ამორფიზირებულია
3,0	გადაკრისტალდება NaA ფორმაში		

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. http://www.zeolite.spb.ru/paper_ww.htm
2. Наполнитель в производстве бумаги и картона. www.makrosprendimai.com/portfolio/elega/ru/usage.html/#35.
3. Цеолит ЦПС - наполнитель для производства картона тарного и писчей бумаги/
<http://www.promc.ru/zeolite/index.php?page=paper>
4. Д.Брек. Цеолитовые молекулярные сита. Москва, 1976, с.768
5. Цицишвили Г.В., Андроникашвили Т.Г., Киров Г.Н., Филизова Л.Д. Природные цеолиты. Москва, Изд-во «Химия», 1985, 223с..
6. Okabe Motoomi Rengo Co Ltd), Kunzawa Naoko (rengo Co Ltd), Fujimoto Yoshinobu (rengo Co Ltd), Sugioka Mak (Rengo Co Ltd), Utsunomiya Takaaki (rengo Co Ltd), Hashimoto Naoaki(Rengo Co Ltd), Sugiyama Koju(rengo Co Ltd). Preparation of Zeolite-Pulp Composites. Journal: Nippon KagakkaiKoenYokoshu. 1999, vol.76th, N 1, p.600.
7. 1988, 8Ф178П. Бактерицидные обои. Заявка 61-138795, Япония N59-260034, МКИ Д21 Н 1/04; Д 21 Н3/78. НахараСабуру, ХачивараДзэндзи, Канэбо К.К..
8. 1991-18Ф229П. Бумага для снижения табачного дыма. Заявка 2-99699. Яп.МКИ⁵Д 21Н 27/00, А 24 Д 1/02/Ито Хитоси-N63-252597;Кокай токкё кохо. Сер.3(5)-1990-15-С. 673-674-Япония.
9. Tsitsishvili V., Dolaberidze N., Alelishvili M., Chipashvili D., Tsintskaladze G., Sturua G., Nijaradze M., Gigolashvili N. Adsorbent of the base of Modified Forms ofAnalcime. –Georgian Engineering News, 1999, #1(9), p.102-104.
10. Журнал-БИТ, 2008, июль, ст. 2.

PREPARATION OF WHITE ZEOLITE FILLER FOR PAPER PRODUCTION

Vladimer Tsitsishvili, Nanuli Dolaberidze, Nato Mirdzveli, Manana Nijaradze
*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

Changes in chemical composition of natural clinoptilolite from Rkoni plot, Georgia, due to interaction with acidic and basic solutions of different concentrations have been studied in the aim to prepare white zeolite filler for paper production. Dependence of discolouration on the chemical composition and optimal conditions of the bleaching are established.

**ПОЛУЧЕНИЕ БЕЛОГО ЦЕОЛИТНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА
БУМАГИ**

В.Г.Цицишвили, Н.М.Долаберидзе, Н.А.Мирдзвели, М.О.Нижарадзе
*Институт физической и органической химии им.П.Г.Меликишвили
Тбилисского государственного университета им.Ив.Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

С целью получения белого цеолитного наполнителя для производства бумаги изучено изменение химического состава природного клиноптилолита участка Ркони, Грузия, в результате взаимодействия с растворами кислот и щелочей разной концентрации. Установлены зависимость степени обесцвечивания от химического состава, а также оптимальные условия этого процесса.

ოქსიდიქლორტრიაზინით ტყავის დათრიმვლა

მ.ქარქაშაძე, ნ.ლომთაძე

აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ტყავის წარმოების მთლიან ტექნოლოგიურ ციკლში ერთ-ერთი ყველაზე მნიშვნელოვანი დათრიმვლის პროცესია, რომლის შესრულების ხარისხზე მნიშვნელოვნადაა დამოკიდებული მზა პროდუქციის ფიზიკო-მექანიკური და საექსპლუატაციო თვისებები.

დათრიმვლა ხორციელდება სხვადასხვა მთრიმლავე მასალებით, რომლებიც შეიცავენ მთრიმლავე ნივთიერებებს. მათგან ყველაზე მეტი გამოყენება აქვს ქრომის მარილებს, დათრიმვლისათვის ახალი მასალების გამოყენების შესაძლებლობის კვლევა ტყავის წარმოების ერთ-ერთი ყველაზე აქტუალური საკითხია. ერთ-ერთ ასეთ მასალას წარმოადგენს ოქსიდიქლორტრიაზინი.

ტრიაზინის წარმოებულები წარმატებით გამოიყენება ბოჭკოვანი მასალების დასამუშავებლად. ყველაზე ხშირად მათი გამოყენება ხდება საღებავებად. ამ საღებავების ამინო- და კარბოქსილის ჯგუფების შემცველ მასალებთან დასაკავშირებლად გამოიყენება ტრიაზინის მონოქლორწარმოებულები ქრომოფორული ჯგუფებით. ამ ნაერთების საღებავად გამოყენების ეფექტურობა განპირობებულია იმით, რომ ისინი ცილებსა და ცელულოზას უერთდება კოვალენტური კავშირის წარმოქმნით. ასეთი ნაერთები წარმატებით გამოიყენება ბეწვეულის შესაღებლად. იმ შემთხვევაში, როცა ტრიაზინის ბირთვი შეიცავს ქლორის ორ ლაბილურ ატომს, ეს ნაერთები შეიძლება გამოყენებული იქნას არა მარტო კოლაგენის ფუნქციონალური ჯგუფების ბლოკირებისათვის, არამედ მის დასათრიმლავედაც.

ქვემოთ აღწერილ ექსპერიმენტებში გამოცდილი იქნა ტყავის დათრიმვლისათვის 2,4-დიქლორ-6-ოქსიტრიაზინის გამოყენების შესაძლებლობა.

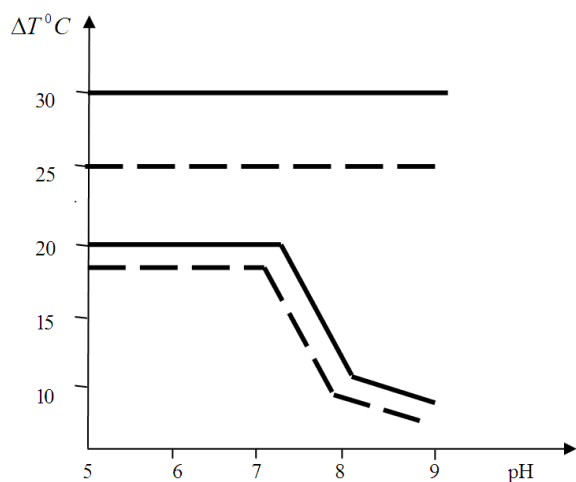
ექსპერიმენტი ჩატარებული იქნა მოხარდის ტიტველაზე. შემოწმებული იქნა დათრიმვლის ეფექტურობაზე ხსნარის pH-ის, მთრიმლავე ნივთიერების კონცენტრაციისა და დამუშავების ხანგრძლივობის გავლენა. დათრიმვლის ხარისხის შეფასება წარმოებდა ნახევარფაბრიკატის მოხარშვის ტემპერატურის ცვლილებით. ცდის შედეგების შედარება ხდებოდა ქრომით დათრიმვლით მიღებულ შედეგებთან.

ნახ.1. ნაჩვენებია ოქსიდიქლორტრიაზინის (ოდქტ) pH და მჟავე გარემოში გარეცხვის ნახევარფაბრიკატის მოხარშვის ტემპერატურის ცვლილებაზე გავლენა. ტიტველას დამუშავება ხდებოდა 7 დღე-ღამის განმავლობაში ოქსიდიქლორტრიაზინის 4%-იანი ხსნარით, თანაფარდობით 1:7. რეაქციის შედეგად გამოყოფილი მარილმჟავის ნეიტრალიზაციისათვის ხსნარს ემატებოდა ჭარბი მაგნიუმის ოქსიდი. მიღებული შედეგები მოწმობენ, რომ დათრიმვლის ეფექტურობა მდგრადია მჟავე გარემოში გარეცხვისას, ვინაიდან მოხარშვის ტემპერატურა არ შეცვლილა, დათრიმვლის ოპტიმალური ეფექტი შეინიშნებოდა, როცა მთრიმლავე ხსნარის pH იყო $5 \div 7$ ზღვრებში.

მე-2 ნახაზზე მოცემულია კოლაგენის დათრიმვლის ეფექტურობაზე ოქსიდიქლორტრიაზინის კონცენტრაციისა და დამუშავების ხანგრძლივობის გავლენის შედეგები. მიღებული მონაცემები მოწმობენ, რომ დათრიმვლის ოპტიმალური ეფექტი შეინიშნება 3%-იანი ოდქტ-ს ხსნარით დათრიმვლისას. ზედმეტი მთრიმლავე ნივთიერების გამოყენებისას მისი ნაწილი უერთდება მონოფუნქციურად, ამასთან ირღვევა შიდასტრუქტურული წყალბადური კავშირის სტრუქტურა.

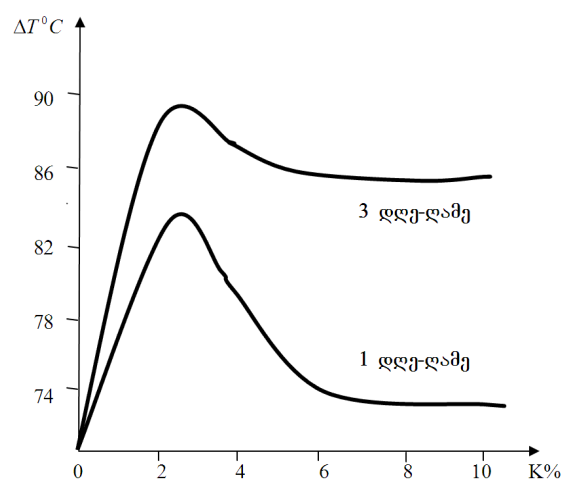
ოქსიდიქლორტრიაზინით ტყავის დათრიმვლის თავისებურებას წარმოადგენს ნახევარფაბრიკატის თეთრი ფერი. იგი მთლიანად ინარჩუნებს ტიტველას ფერს. დერმის გამუქება შეიმჩნევა მხოლოდ მაშინ, როცა ხსნარის pH-ის მნიშვნელობა 8-ზე მეტია. აქედან გამომდინარე შეიძლება დავასკვნათ, რომ ტყავის დათრიმვლისათვის ოდქტ-ის გამოყენება განსაკუთრებით ეფექტურია თეთრი ფერის ტყავის დამზადებისათვის.

ამრიგად, ჩატარებული სამუშაოს შედეგად დადგინდა იქნა დათრიმვლისათვის ოქსიდიქლორტრიაზინის გამოყენების შესაძლებლობა, განსაზღვრული იქნა ხსნარის pH ოპტიმალური მნიშვნელობა.



ნახ. 1. ღერმის მოხარშვის ტემპერატურის ცვლილებაზე მთრიმლაკი მასალის ხსნარის pH-ისა და მჟავე გარემოში გარეცხვის გავლენა

- 1 – ქრომის მარილებით დამუშავებული ღერმა
- 2 – ქრომის მარილებით დამუშავებული და შემდეგ მჟავე გარემოში გარეცხილი ღერმა;
- 3 – ოდქტ დამუშავებული ღერმა;
- 4 – ოდქტ დამუშავებული და შემდეგ მჟავე გარემოში გარეცხილი ღერმა



ნახ. 2. ღერმის მოხარშვის ტემპერატურის ცვლილებაზე ოდქტ კონცენტრაციისა და დამუშავების ხანგრძლივობის გავლენა

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Торосян Ю.В., Прохоров В.Т. Нанотехнологии как путь обеспечения экологически безопасных технологических процессов при изготовлении изделий из кожи. Кожевенно-обувная промышленность, №5; 2010, с. 20-21.

TANNING OF SKIN BY OXYDICHLOROTRIAZINE

M.I.Karkashadze, N.Z.Lomtadze
Akaki Tsereteli Kutaisi State University

SUMMARY

In article it is described possibility of application of oxydichlorotriazine for a tanning of skin. It is established optimum pH values of solution, concentration of a tanning agent and processing duration, and also it is revealed that it is possible to apply oxydichlorotriazine to a tanning of white skin as after a tanning the semi-finished product completely keeps color.

ДУБЛЕНИЕ КОЖ ОКСИДИХЛОРТРИАЗИНОМ

М.И.Каркашадзе, Н.З.Ломтадзе
Кутаисский Государственный Университет им. Акакия Церетели

РЕЗЮМЕ

Описана возможность применения оксидихлортриазина для дубления кож. Установлено оптимальное значения pH раствора, концентрация дубителя и длительность обработки, а также выявлено, что оксидихлортриазин можно применять для дубления белых кож, так как после дубления полуфабрикат полностью сохраняет цвет голя.

ქიმიური ტექნოლოგია

დურალუმინის ანოდური ოქსიდირება და გაშავება

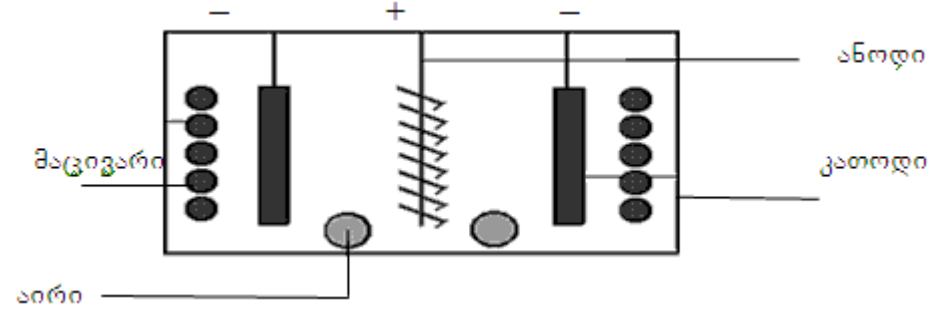
ვაჟა ღარიბაშვილი, ვალერიან მეტრეველი, ეთერ გოზალიშვილი, ზურაბ მირიჯანაშვილი,
 ალექსანდრე კანდელაკი
 ფერდინანდ თავაძის მეტალურგიისა და მასალათმცოდნეობის ინსტიტუტი

ალუმინისა და მისი შენადნობების ნაკეთობებისთვის განსაკუთრებული ზედაპირული თვისებების მინიჭების, მაგ. კოროზია- ან ცვეთამდეგობის გაზრდისათვის შესაძლებელია სხვადასხვა სახის ზედაპირული დამუშავების გამოყენება, კერძოდ ანოდური ოქსიდირების შემთხვევაში შესაძლებელია ზედაპირის შემდგომი შეღებვა სხვადასხვა მეთოდების გამოყენებით. დამცავი ფენის წარმოსაქმნელად ნაკეთობებს უტარდება ანოდირება. მიღებული თხელი ოქსიდური ფენა საიმედოდ იცავს ლითონს კოროზიისაგან. ამავე დროს იგი არის კარგი ფუძე ლაქსაღებავებით შეღებვისათვის, გააჩნია კარგი ელექტროსაიზოლაციო თვისებები. ანოდირებას იყენებენ, აგრეთვე, დეკორატიული მიზნებით, ვინაიდან იძლევა ზედაპირის სხვადასხვა ფერად შეღებვის საშუალებას.

მსოფლიოს მოწინავე ქვეყნებში უამრავი ფირმა აწარმოებს ალუმინის და მისი შენადნობების ანოდირებას. ანოდირებული ზედაპირის შემდგომი დამუშავებით საღებავების და სხვადასხვა სპეციალური მეთოდების გამოყენებით შესაძლებელია მივიღოთ ნებისმიერი სასურველი შეფერილობა [1,2]. დიდი მოთხოვნილებაა ანოდირებულ ალუმინზე და მის შენადნობებზე სიმსუბუქის და მრავალი სხვადასხვა მექანიკური, კოროზიული, დეკორატიული და ა.შ. თვისებების გამო.

ანოდირების მრავალი მეთოდიდან კომერციულ-ინდუსტრიული გამოყენება მხოლოდ რამოდენიმეს აქვს. მათ შორისაა ანოდირება ქრომის, მჟაუნ-, ფოსფორის, ბორის, ორგანულ და გოგირდის მჟავებში. ყველა ამ მეთოდიდან შედარებით უფრო ფართოდ გამოიყენება ანოდირება გოგირდმჟავაში, როდესაც წარმოიქმნება 0,00254-0,0254 მმ სისქის დანაფარი მოყავისფრო, მოყვითალო ან ნაცრისფერი შეფერილობით, რაც განისაზღვრება შენადნობის ტიპით და დანაფარის სისქით.

ყველა შემთხვევაში ანოდზე მიმდინარე პროცესი გამოისახება რეაქციით $2Al + 3H_2O \rightarrow Al_2O_3 + 6H^+ + 6e$, ხოლო კათოდზე მიმდინარე $- 6H^+ + 6e \rightarrow 3H_2 \uparrow$. ჯამური რეაქცია იქნება $2Al + 3 H_2O \rightarrow Al_2O_3 + 3H_2 \uparrow$ [3], რომელიც შესაძლებელია ჩატარდეს შემდეგი სქემით (სურ.1):



სურ. 1. ანოდირების სქემა.

კარგი ანოდური დანაფარის მისაღებად აუცილებელია საწყისი მასალის შედგენილობის ცოდნა, რადგან ყველა მალევირებელ ელემენტს აქვს მისთვის დამახასიათებელი გავლენა ანოდირების პროცესზე.

ალუმინის დეფორმირებადი შენადნობებიდან (დურალუმინებიდან) ძლიერ დატვირთული კონსტრუქციების დასამზადებლად ფართოდ გამოიყენება B95 მარკის (AlZn6MgCu) შენადნობი, რომელიც გამოირჩევა მაღალი სიმტკიცით (600-700მპა) და მასთან მიახლოებული დენადობის ზღვრის მაჩვენებლით. ამ შენადნობიდან დამზადებულ დეტალებს ხშირად მოეთხოვებათ ზედაპირების დაფარვა შავი, გახუნების მიმართ მედეგი ფენით, რაც შესაძლებელია მხოლოდ ანოდირებით და შემდგომი შეღებვით.

სამუშაოს მიზანს წარმოადგენდა B95 მარკის ალუმინის შენადნობის სალი ანოდირების და მისი გაშავების პროცესის ტექნოლოგიის დამუშავება.

ანოდირება ტარდებოდა მინის აბაზანაში. ელექტროლიტად გამოიყენდა როგორც სოდა-მარილის (NaHCO₃+NaCl) ნაჯერი წყალხსნარების ნარევი, შეფარდებით 9:1, ასევე გოგირდმჟავას სხვადასხვა კონცენტრაციის წყალხსნარები. კათოდად გამოიყენებოდა ტყვიის 1,5 მმ სისქის ფურცელი.

ანოდირების პროცესის საწყის სტადიაში დიდი მნიშვნელობა აქვს ზედაპირის მომზადებას. თხელი ზუმფარის ქაღალდით გაწმენდის შემდეგ ხდებოდა გაუცხიძოვნება აცეტონით, მოწამლვა ნატრიუმის ჰიდროქსიდის 9-10%-იან ხსნარში 60-70°C ტემპერატურაზე 2-3 წუთის განმავლობაში. ამ დროს დეტალის ზედაპირზე ჩნდებოდა მინარევების შავი ნაღები, რომლის მოცილება ხდებოდა აზოტმჟავას 10-15% ხსნარში.

ოთახის ტემპერატურაზე ელექტროლიზი უტარდებოდა ნიმუშებს მუდმივი დენის სიმკვრივის (15 მა/სმ²) და დროის ხანგრძლივობის (60 წთ) პირობებში. დანაფარის ხარისხი ფასდებოდა მისი სისქის მიხედვით, რაც კონტროლდებოდა მიკროსტრუქტურული ანალიზით ოპტიკურ მიკროსკოპზე “Neophot-21”. შედეგები მოყვანილია ცხრ. 1-ში.

ცხრილი 1. ოქსიდირება ოთახის ტემპერატურაზე

№	ელექტროლიტი	კონცენტრაცია, %	დანაფარის სისქე მკმ.
1	NaHCO ₃ +NaCl (9:1)	ნაჯგერი ხს.	10-15
2	H ₂ SO ₄	15%	20-25
3	H ₂ SO ₄	18%	25-30
4	H ₂ SO ₄	20%	25-30

ცხრილიდან ჩანს, რომ უკეთესი შედეგი მიიღება ელექტროლიტად გოგირდმჟავას 18-20%-იანი წყალხსნარის, გამოყენების შემთხვევაში. ამიტომ შემდგომი ექსპერიმენტები ტარდებოდა სწორედ ამ ელექტროლიტის პირობებში. გამოიცადა ორი ტემპერატურული რეჟიმი 27-30°C და 5,0°C (სალი ანოდირება). ამ უკანასკნელის მისაღწევად ელექტროლიზი იღმებოდა ყინულიანი წყლის აბაზანაში. ექსპერიმენტების ჩატარებისას იცვლებოდა დენის სიმკვრივე 0,015±0,35 ა/სმ²-სა და პროცესის ხანგრძლივობა 15-90 წთ-ის ფარგლებში. ყოველი ცდის შემდეგ მოწმდებოდა და კორექტირდებოდა ელექტროლიტის კონცენტრაცია, ან ის მთლიანად იცვლებოდა ახლით. დანაფარის სისქის კონტროლი ამ შემთხვევაშიც ხდებოდა მიკროსტრუქტურული ანალიზით. ოქსიდირებული ნიმუშები ირეცხებოდა გამდინარე წყალში და იღებოდა. ცდების შედეგები მოყვანილია ცხრ. 2-ში.

ცხრილი 2. ოქსიდირება სხვადასხვა რეჟიმებით

№	ტემპ., °C	დენის სიმკვრივე, ა/სმ ²	ხანგრძ., წთ	დანაფარის სისქე, მკმ
1	27-30	0,015	30	16-20
2	27-30	0,015	90	25-30
3	27-30	0,025	30	20-25
4	27-30	0,025	90	20-25
5	5,0	0,1	30	55 -60
6	5,0	0,1	15	55-60
7	5,0	0,2	15	85-100
8	5,0	0,25	15	145-180
9	5,0	0,3	15	115- 135

როგორც ცხრილიდან ჩანს დანაფარების მაქსიმალური სისქე მიიღება სალი ანოდირების დროს 5,0°C ტემპერატურის, 0,25 ა/სმ² დენის სიმკვრივისა და 15 წუთის ხანგრძლივობის პირობებში.

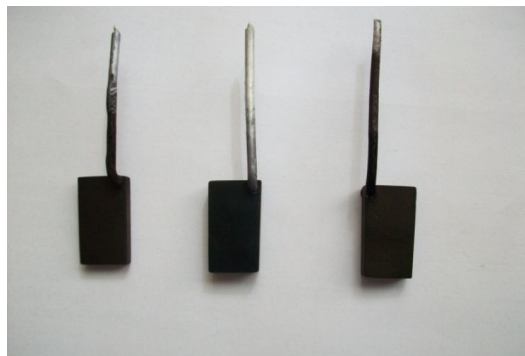
შეღებვა ხდებოდა როგორც ქიმიურად, ისე ელექტროლიტურად. ელექტროლიტური შეღებვისას გამოიყენებოდა 50 ჰკ სიხშირის ცვლადი დენი, ხოლო ელექტროლიტად სპილენძის სულფატის, ამონიუმის სულფატის და ბორის მჟავას წყალხსნარი [3], გ/ლ: CuSO₄ – 10; (NH₄)₂SO₄ – 30; H₃BO₃ – 50. პროცესის ტემპერატურა 20°C. დამხმარე ელექტროდს წარმოადგენდა ცილინდრული ფორმის გრაფიტი. დენის სიმკვრივე იცვლებოდა 2,5±4,5 მა/სმ²-ის ფარგლებში.

ქიმიური შეღებვისთვის გამოიცადა უნივერსალური და ანილინის შავი საღებავები, აგრეთვე ორი ხსნარი – კობალტის აცეტატი Co(OCOCH₃)₂ 5-10 გრ 100-მლ წყალზე და კალიუმის პერმანგანატი KMnO₄ 1,5-2,5 გრ 100-მლ წყალზე. ამ ორ უკანასკნელში ნიმუში ყოვნდებოდა მორიგეობით 5-10 წუთის განმავლობაში და ირეცხებოდა გამდინარე წყალში. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ როგორც ორმაგი შეღებვით, ისე უნივერსალური შავი საღებავით შეღებვისას მიიღებოდა რუხი შეფერილობა, ნაცვლად შავისა (სურ.2).

სასურველი შედეგის მიღწევა შეუძლებელი გახდა ელექტროლიტური შედეგის შემთხვევაშიც. ამ დროს ნიმუშების ფერი პრაქტიკულად არ იცვლებოდა.



სურ. 2. უნივერსალური შავი და ორმაგი საღებავით შეღებილი ნიმუშები



სურ. 3. ანილინის საღებავით შეღებილი ნიმუშები

შავი ფერი მიიღებოდა მხოლოდ ანილინის შავი საღებავის გამოყენებით (სურ.3). საღებავი მზადდებოდა 15 გ ანილინის ფხვნილისა და 1 მლ ძმარმჟავას გახსნით ერთ ლიტრ წყალში. შეღებვა წარმოებდა ოთახის ტემპერატურაზე 20-25 წუთის, ან ცხლად - 50-60°C ტემპერატურაზე 2,5-3,0 წუთის განმავლობაში. შეღებილი დანაფარის გამკვრივება ხდებოდა ნიმუშების მოთავსებით მღულარე გამოხდილ წყალში 10-15 წუთის დაყოვნებით. გამკვრივების პროცესი ამცირებს ზედაპირის ცვეთა და კოროზიამდედგობას, მაგრამ ის აუცილებელია შედეგის შემდეგ. ამ დროს ხდება ალუმინის ოქსიდის გარდაქმნა ალუმინის ჰიდრატში - ბიომიტი (AlOOH) [4], რომლის მოცულობა მეტია და ხდება ფოროვანი სტრუქტურის დახშობა. უფრო დაბალ ტემპერატურაზე მიღებული ჰიდრატი ბევრად უფრო რბილი და ნაკლებად მტკიცეა [5].

მიღებულ ნიმუშებს ზოგ შემთხვევაში დაჰკრავდათ მუქი ყავისფერი შეფერილობა, რაც შესაძლოა გამოწვეული იყოს, როგორც მოძველებული საღებავის გამოყენებით, ისე ანოდირების რეჟიმების (ელექტროლიტის კონცენტრაცია, დენის სიმკვრივე, პროცესის ხანგრძლივობა, ტემპერატურა) დარღვევით.

შეღებილი ზედაპირების მდგრადობა გახუნების მიმართ შესწავლილი იყო როგორც ხელოვნური დასხივების, ასევე მათი ღია ატმოსფეროში ექსპონირების პირობებში ნატურალური და სინთეტიკური საღებავებით შეღებილი მასალების გახუნებადობისადმი მდგრადობის ძირითადი განმსაზღვრელი ფაქტორია ულტრაიისფერი გამოსხივება, ხოლო ხილვადი სინათლის ეფექტი გაცილებით ნაკლებია [6]. ამასთანავე აღსანიშნავია, რომ ნატურალური საღებავების დეგრადაციას იწვევს ულტრაიისფერი გამოსხივების შედარებით ნაკლები სიგრძის ტალღები (280-315 ნმ), რაც შეეხება ორგანულ საღებავებს მათზე ძლიერ მოქმედებს მზის ხილული რადიაცია და ულტრაიისფერი გამოსხივების ხილვადთან ახლო მდებარე სპექტრი [7].

ნიმუშები შეისწავლებოდა ვიზუალურად და გამოცდების სხვადასხვა პერიოდისთვის ხდებოდა მიღებული შედეგების ფოტოგრაფიული მონიტორინგი (სურ.4).



სურ. 4. შეღებილი ნიმუშები დასხივების და კლიმატურ პირობებში ექსპონირების შემდეგ. (ა)-სალი ანოდირება, (ბ)- ჩვეულებრივი ანოდირება

ხელოვნური დასხივების ექსპერიმენტი ულტრაიისფერი დასხივების ღირის განსაზღვრის სტანდარტული მეთოდების მოთხოვნების გათვალისწინებით [8] გრძელდებოდა 60 საათის განმავლობაში. გამოსხივების კონცენტრირება ნიმუშებზე ხდებოდა ამრეკლავი ფოლგის საშუალებით.

ანოდირებული, ანილინის საღებავის გამოყენებით შავად შეღებილი ნიმუშებიდან დასხივების ~800 კვ/სმ² ღირის შემდეგ ვიზუალურად უცვლელი იყო საღად ანოდირებული ნიმუშები, ხოლო ჩვეულებრივი ანოდირების შემდეგ შეღებილი შენადნობი ულტრაიისფერი დასხივების ~750 კვ/სმ² ღირის შემდეგ განაცრისფრდა.

კლიმატურ პირობებში 450 სთ-იანი გამოცდების შემდეგ საღად ანოდირებულმა შეღებილმა ნიმუშებმა შეინარჩუნეს საწყისი შეფერილობა, ხოლო ჩვეულებრივი ანოდირების შემდეგ შეღებილი ნიმუშების შეფერილობა გახდა მოყავისფრო-სპილენძისფერი (სურ.4).

5,0⁰C ტემპერატურის, 0,25 ა/სმ² დენის სიმკვრივისა და 15 წუთის ხანგრძლივობის პირობებში მიღებული მაქსიმალური სისქის სალი ანოდირების შემდეგ ანილინის საღებავით შეღებილი AlZn6MgCu შენადნობი ინარჩუნებს შავ ფერს და ხასიათდება გახუნებადობისადმი მდგრადობით.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Yann Goueffona, Laurent Aruraultb, Sandra Fontorbes, Catherine Mabruc, Claire Tonond, Pascale Guigues. Chemical characteristics, mechanical and thermo-optical properties of black anodic films prepared on 7175 aluminium alloy for space applications. *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 120 (n. 2-3).2010, pp. 636-642.
2. <http://www.rapidfirepaintball.ca/Anodizing%20Aluminum.htm#jiggin>
3. H. Sharawy , M. E. Ossman, M. S. Mansour. Kinetics modeling and Adsorption isotherm studies for Cr(III) removal using Boehmite Nano-powder. *IJCBS*, 3(2013):9-18
4. Chr. Girginov, I. Kanazirski, A. Zahariev, P. Stefchev. Electrolytic colouring of anodic alumina films in metal ions containing solution.Part one: electrolytic colouring in NiSO₄ containing solution. *Journal of the University of Chemical Technology and Metallurgy*, 47, 2, 2012, 187-192.
5. <http://www.alu.dk/videnbaser/modul/albook40.htm>
6. Crews PC. A comparison of clear versus yellow ultraviolet filters in reducing fading of selected dyes. *Studies in Conservation* 1988;33:87-93.
7. Kunio Yoshizumi, Patricia Cox Crews. Characteristics of fading of wool cloth dyed with selected natural dyestuffs on the basis of solar radiant energy. University of Nebraska – Lincoln. Digital Commons. University of Nebraska – Lincoln. 4-5-2003
8. J.R.Bolton, K.G. linden, G.A.Sorial –ASCE Managing Editor. Standardization of Methods for Fluence (UV Dose) Determination in Bench-Scale UV Experiments. *Journal of Environmental Engineering* © ASCE / March 2003, p.p.209-215.

ANODIC OXIDATION AND BLACKENING OF DURALUMIN

Vazha Garibashvili, Valerian Metreveli, Eter Gozalishvili, Zurab Mirijanashvili, Aleqsandre Kandelaki
Ferdinand Tavadze Insnitute of Metallurgy and Materials Science

SUMMARY

The blackening of the AlZn6MgCu aluminum alloy was done by the method of anodizing and coloring. The samples which were hard anodized in sulfuric acid solution (<5⁰C) and colored by black aniline dye have the best protective properties against corrosion and fading by ultraviolet radiation and exposure to harsh climatic conditions.

АНОДНОЕ ОКСИДИРОВАНИЕ И ЧЕРНЕНИЕ ДУРАЛЮМИНА

В.И.Гарибашвили, В.Ш.Метревели, Э.И.Гозалишвили, З.М.Мириджанашвили, А.З.Канделаки
Институт металлургии и материаловедения им. Ф.Тавадзе

РЕЗЮМЕ

Методом анодирования и окраски осуществлено чернение алюминиевого сплава AlZn6MgCu. Лучшими защитными свойствами против коррозии и обесцвечивания при ультрафиолетовом облучении и экспонировании в сложных климатических условиях обладают образцы, твердоанодированные (<5⁰C) в растворе серной кислоты и окрашенные черным анилиновым красителем.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКИ ПРИ ИЗГОТОВЛЕНИИ ОДЕЖДЫ ИЗ ИСКУССТВЕННОГО МЕХА

Н.А.Долидзе

Кутаисский государственный университет им. А.Церетели

Развитие швейной промышленности тесно связано с увеличением объема выпуска материалов с химическими волокнами. Характерной тенденцией изменения сырьевой базы текстильной промышленности во всех промышленно развитых странах является неуклонный рост объемов производства и потребления химических волокон на основе природного и синтетического сырья. Преимуществом химических волокон являются их ценные свойства, высокая технико-экономическая эффективность, дешевизна и доступность сырьевой базы. Немаловажным фактором развития производства химических волокон является и то, что растущие потребности населения в текстильных изделиях не могут быть удовлетворены при помощи ресурсов натурального сырья. Изменение сырьевой базы текстильной промышленности в результате ее химизации вызывает ряд проблем в технологии швейных изделий, связанных с обработкой синтетических материалов ниточным способом в процессе изготовления одежды. Известно, что при пошиве изделий на высоких скоростях игла швейной машины нагревается до 300°-400°С. Химические волокна обладают сравнительно низкой температурой плавления, поэтому при соприкосновении с нагретой иглой они плавятся, забивая при этом ушко иглы и заправляя шов. Первое приводит к обрыву игольной нитки и к необходимости замены игл, второе – к излишней жесткости и хрупкости шва. В результате приходится снижать скорость работы машин, что приводит к потере производительности оборудования и труда. Пошив синтетических материалов требует, кроме того, применения швейных ниток того же химического состава, что и материал, в противном случае появляется морщинистость швов в процессе пошива [1]. Устранение перечисленных выше недостатков стало возможным при применении безниточного способа соединения – сварки для изготовления одежды из синтетических материалов, осуществление которого обусловлено термопластическими свойствами этих материалов. Одним из наиболее приемлемых для швейной промышленности оказался способ соединения материалов ультразвуковой сваркой.

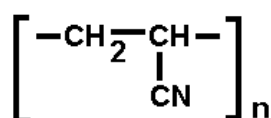
Повышенный спрос населения на изделия из натурального меха, который не полностью удовлетворяется, определил проблему создания меха, имитирующего натуральный, искусственным способом [2]. Создание технологии искусственного меха стало возможным благодаря развитию производства химических волокон различных видов, структур и свойств, разработке оригинального оборудования для изготовления искусственного меха, химикатов и красителей. Существующая технология изготовления одежды из искусственного меха ниточным способом является трудоемкой, характеризуется низкой производительностью и повышенным расходом ниток. Наиболее перспективным методом при изготовлении одежды из искусственного меха является ультразвуковая (УЗ) сварка.

Целью данной работы является исследование возможности применения ультразвуковой сварки при изготовлении одежды из искусственного меха. Трикотажный мех состоит из двух компонентов различных по своему строению, свойствам и назначению – грунта и ворса. Определяющими качествами искусственного меха являются свойства ворса. От последних зависит внешний вид меха, его большее или меньшее сходство с натуральным. В данной работе для исследования процесса ультразвуковой сварки искусственного меха в качестве объекта исследования был выбран трикотажный искусственный мех арт. Н-9-15/9148, грунтом которого является кулирное переплетение гладь Х/Б пряжи, а ворсом полиакрилонитрильные (ПАН) волокна. В таблице 1 приведены физико-механические показатели искусственного меха указанного артикула.

Таблица 1. Физико-механические показатели искусственного меха арт. Н-9-15/9148

Поверхностная плотность г/м ²	Волокно		Длина ворса мм	Число нитей на 10 см		Разрывная нагрузка Н/см	
	ворса	грунта		По длине	По ширине	По Длине	По ширине
495	Полиакрилонитрил	Хлопок	12	50 петель	100 петель	180	180

Антисептическую обработку волокна осуществляют эмульсией ОС-20, которая представляет собой текстильно-вспомогательное вещество – смесь полиоксиэтиленгликолевых эфиров высших жирных спиртов. С целью придания грунту меха каркасности и закрепления в нем ворса, его аппретируют латексом БС-50, который представляет собой продукт полимеризации бутадиона со стиролом в соотношении 50:50 (по массе). Основным сырьем для изготовления выбранного нами искусственного меха является полиакрилонитрильное волокно (ПАН), которое получают из полиакрилонитрила. Полиакрилонитрил-карбоцепной, линейный полимер, его получают полимеризацией акрилонитрила в присутствии перекисных инициаторов или diazosоединений. Структурная формула полиакрилонитрила имеет следующий вид:



Полиакрилонитрил имеет хорошие физико-механические показатели. Полиакрилонитрильные волокна отличаются максимальной светостойкостью, высокой прочностью, которая практически одинакова в сухом и мокром состоянии. Следует отметить плохую окрашиваемость полимера, что можно устранить в значительной мере путем сополимеризации акрилонитрила с другими мономерами. Сополимеризация приводит к снижению жесткости макромолекул, облегчению ориентации цепей, к повышению усадочности, что используется при получении из него искусственного меха. Достоинством волокна можно считать высокие теплозащитные свойства. По температуропроводности ПАН волокна близка к шерсти. Согласно современным представлениям о сварке [3], к хорошо сваривающимся относятся полимеры с низкой температурой плавления и широким интервалом температур перехода от вязко-текучего состояния к температуре деструкции полимера. Исходя из этих представлений, полиакрилонитрил относится к трудносваривающимся полимерам, так как имеет достаточно высокую температуру плавления (310°C) и сравнительно узкий температурный интервал вязко-текучего состояния. В связи с этим требуются специальные меры по искусственному снижению вязкости, что будет предусмотрено при разработке технологий УЗ сварки искусственного меха.

Таким образом, на основе проведенных исследований можно сделать вывод, что исходя из того, что определяющими качествами искусственного меха являются свойства ворса, при применении специальных мер по искусственному снижению вязкости ПАН волокно при соединений деталей одежды из выбранного в работе искусственного меха (артикул Н-9-15/9148) можно применять способ ультразвуковой сварки.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Клеткин И.Д., Крючков Н.В., Морева Р.Ф., Полухин В.П., Деулин Б.Л.; Ультразвуковая сварка при изготовлении одежды, М.: Легкая индустрия, 1999. 336 с.
2. Гонтаренко А.Н., Рукавцев Г.И., Смирнов Л.С. Технология искусственного меха. Киев, ехника, 1984. 182 с
3. Кокеткин П.П. Механические и физические способы соединения деталей швейных изделий. М.: Легкая и пищевая промышленность, 2003. 200 с.

**ულტრაბგერითი შეღებვის მეთოდის გამოყენების შესაძლებლობების კვლევა
ხელოვნური ბეწვის ტანსაცმლის დამზადების დროს**

ნ.ა.დოლიძე

*ქუთაისის ა. წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი***რეზიუმე**

სამუშაოში განხილულია ულტრაბგერითი შეღებვის მეთოდის გამოყენების საკითხები ხელოვნური ბეწვის ტანსაცმლის დამზადების დროს. დადგენილი იქნა, რომ საფეიქრო მრეწველობის ნედლეულის ბაზის ცვლილებამ და ახალი სინთეტიკური ქსოვილების გამოჩენამ წარმოქმნა მთელი რიგი პრობლემები, რომლებიც დაკავშირებულია სინთეტიკური ქსოვილებისაგან დამზადებული ტანსაცმლის დეტალების ტრადიციული ძაფით შეერთების მეთოდის გამოყენებასთან. ქიმიური ბოჭკოს შემცველი ქსოვილების შესაერთებლად მიზანშეწონილია ულტრაბგერითი შეღებვის მეთოდის გამოყენება. დადგენილი იქნა, რომ ხელოვნური ბეწვის (არტ. H-9-15/9148) ხაოს (პან) თერმოპლასტიკური თვისებები საშუალებას იძლევა ულტრაბგერითი შეღებვის მეთოდის გამოყენებისა ხელოვნური ბეწვის ტანსაცმლის დამზადების დროს..

**OF THE STUDY OF ULTRASONIC WELDING WITH FAUX FOR CLOTHING
MANUFACTURERS**

N.A.Dolidze

*Kutaisi A.Tsereteli State University***SUMMARY**

The paper deals with the application of ultrasonic welding method with faux for clothing manufacturers. Found that changing the raw material base of the textile industry as a result of her himizacij raises a number of problems in technology of garments, processing of synthetic materials thread method in the process of making clothes. One of the most suitable for the clothing industry was a way of connecting material ultrasonic svarkoû. Found that the thermoplastic properties of pile (PAN) faux fur (h-9-15/9148) allows the use of an ultrasonic welding with faux fur clothing manufacturers.

**УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДА ФОРМОВАНИЯ ДЕТАЛЕЙ ОДЕЖДЫ ИЗ
ПОЛИЭФИР-ИЗОЦИАНАТНЫХ КОМПОЗИТОВ**

М.В.Датуашвили

Кутаисский государственный университет А. Церетели. merabidat@mail.ru

Улучшение качества швейных изделий, а также обновление их ассортимента обеспечиваются как путем внедрения новых моделей и совершенствования конструкции изделий, использования современной техники и технологии их изготовления, так и путем применения для них новых материалов.

Новые по структуре и свойствам материалы создаются благодаря применению современных видов химических волокон и нитей, высококачественных красителей и отделочных химических материалов [1].

С точки зрения использования химических материалов в процессе изготовления швейных изделия большой интерес представляет эластичный полиуретановый поропласт – пенополиуретан.

Полиуретановый поропласт износоустойчив, хорошо сохраняет форму, стоек к действию моющих средств и растворителей, отличается высокой сопротивляемостью к окислению, обладает высокой воздухопроницаемостью. Поропласт физиологически безвреден. В настоящее время полиуретановый поропласт применяется для изготовления прокладочных материалов для мужских и женских пальто, плащей, курток, перчатных изделий, плечевых накладок, бюстгальтеров, головных уборов и др [2].

Сущность придания формы изделию из полиуретанового поропласта заключается в том, что предварительно приготовленную полиэфир-изоцианатную композицию заливают в специальные ограничительные формующие приспособление (пресс-формы), в которых происходит вспенивание и образование полиуретанового поропласта. Изделие или детали изделия изготавливаются примерно за четверть часа [2].

Целью настоящей работы являлось исследование процессов смешивания композиции в открытом сосуде с помощью быстросходной мешалки; заливки смеси в форму и теплообработки. Исследование проводилось на формованных изделиях куполообразной формы в виде чашки бюстгальтера. Качество полученных изделий оценивалось органолептически: по эластичности, характеру поверхности, характеру структуры пор в пеноматериале.

Активную смесь, состоящую из катализатора эмульгаторов (полиэтиленоксид, сульфаты жирных кислот), воды и парафинового масла (для формирования пор), готовили в отдельном сосуде при тщательном перемешивании компонентов. Затем перемешивали полиэфир с активаторной смесью в течение 3-х минут; добавляли расчетное количество диизоцианата и перемешивали в течение 12-15 секунд. Далее содержимое сосуда быстро и равномерно заливали в формы.

В качестве смазки для формы использовали машинное масло, солидол, вазелиновое масло, восковую паркетную мастику.

Количество полиуретановой смеси для заполнения прессформы зависит от объема формы и задаваемой плотности пеноматериала.

После заливки смеси форму закрывали фторопластовой крышкой, имеющей отверстие для выхода образующихся газов. Термообработку формы проводили в сушильном шкафу.

Результаты проведенных исследований представлены на графиках (рис. 1, 2, 3).

Как показывают результаты исследований, температура внутренних слоев может достигать больших значений, особенно при уменьшении объемного веса поропласта (рис. 1).

Температура внутренних слоев поропласта зависит от содержания толуилндиизоцианата в композиции. Максимальная температура развивается при стехиометрическом содержании диизоцианата (коэффициент пены – 100). При больших или меньших значениях этой величины температура уменьшается (рис. 2).

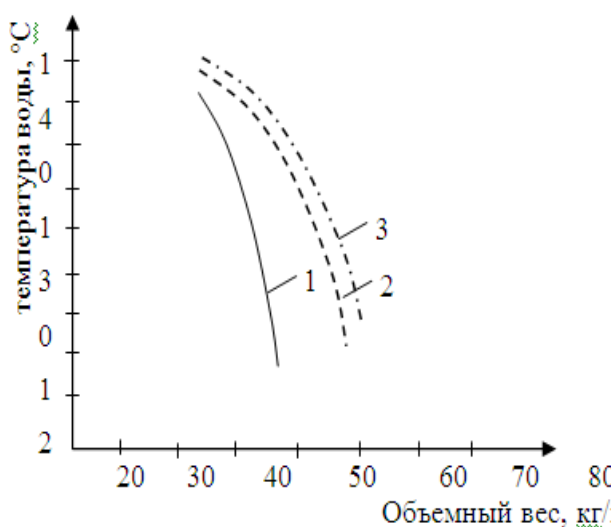


Рис. 1. График зависимости температуры в сердцевине блока полиуретанового поропласта от объемного веса при различных коэффициента пены:
1 – 90; 2 – 105; 3 – 100.

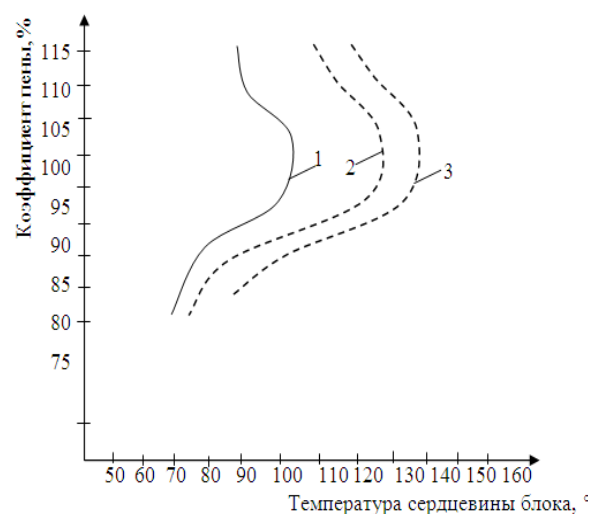


Рис. 2. График зависимости температуры во внутренних слоях поропласта от высоты пены с объемным весом:
1 – 50 кг/м³; 2 – 35 кг/м³; 3 – 28 кг/м³.

Температура внутренних слоев поропласта зависит также от высоты пены. С уменьшением высоты пены температура внутренних слоев заметно снижается (рис.3).

При получении тонкостенных изделий для нормального протекания физико-химических процессов, а следовательно, и получения формованных изделий хорошего качества, количество подводимого тепла должно увеличиваться пропорционально уменьшению толщины стенки изделия.

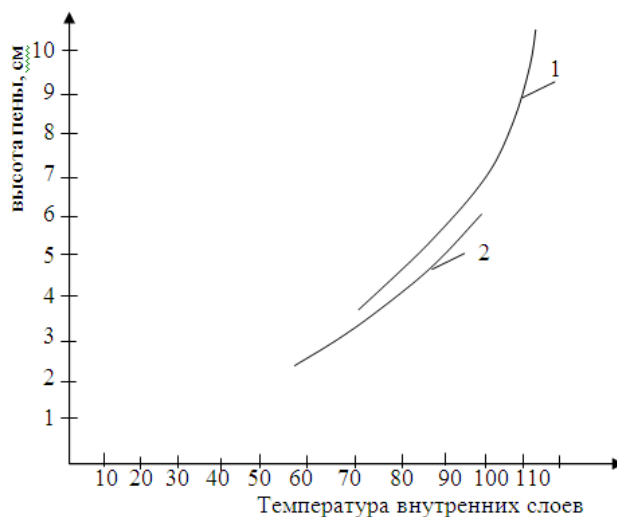


Рис. 3. График зависимости температуры в сердцевине блока полиуретанового поропласта от коэффициента пены при объемном весе: 1 – 28 кг/м³; 2 – 35 кг/м³.

В результате обработки данных исследований установлены следующие технологические особенности формования полиуретанового изделия куполообразной формы:

- поверхностные раковины и отдельные затвердевшие участки являются результатом реакции между изоцианатом и смазывающим веществом; в качестве смазывающих веществ предпочтительно применять восковую паркетную мастику;
- неоднородное расположение и неодинаковая величина пор, а также небольшие трещины связаны с неравномерной заливкой полиэфир-изоцианитной смеси в форму;

- воздушные пузырьки, раковины и разрывы в изделиях являются результатом попадания воздуха в полиэфир-изоцианатную композицию в форме;
- предварительное отверждение лучше осуществлять при температуре формы до 90°C в течении 8÷10 минут; окончательное отверждение – при температуре 80°C в течение 40÷50 минут.

Учитывая перечисленные особенности процесса формования, были изготовлены опытные образцы формовочных изделий. Так как органолептически метод анализа качественных показателей дал положительный результат, можно сделать следующий вывод: вышеизложенные рекомендации успешно можно использовать не только в швейной промышленности, но и в различных отраслях народного хозяйства.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Бузов Б.А., Модестова Т.А., Алименкова Н.Д. материаловедение швейного производства. – М.: Легпромбытиздат, 1986, - 424 с.
2. Датуашвили М.В. Разработка рационального пакета одежды специального назначения. Кутаиси: 2009, - 164 с.
3. Любартович С.А., Морозов Ю.Л., Третьяков О.Б. Реакционное формование полиуретанов. – М.: Химия. 1990, - 288 с.

ტანსაცმლის დეტალთა ფორმირების მეთოდების სრულყოფა პოლიეთერ-იზოციანატური კომპოზიტებისაგან

მერაბ დათუაშვილი
ქუთაისის აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

რეზიუმე

სტატიაში განხილულია სამკერვალო ნაწარმის დეტალთა ფორმირების პროცესები პოლიეთერ-იზოციანატური კომპოზიტებისაგან. საცდელი ნიმუშების ორგანოლექტიკური დაკვირვების საფუძველზე დადგინდა, რომ ფორმირებული დეტალების ზედაპირების დაზიანება იზოციანატსა და ყალების ზედაპირის საპოხ საშუალებას შორის მიმდინარე რეაქციით, ხოლო ფორებისა და ჰაერის ბუშტუკების არაერთგვაროვნება შეზავებული მასის ყალიბში ჩასხმის პროცესებითაა განპირობებული. ექსპერიმენტალურ მონაცემებზე დაყრდნობით დადგენილი იქნა პოლიეთერ-იზოციანატური კომპოზიტებისგან ფორმირებული დეტალების გამყარების ტემპერატურული რეჟიმები.

IMPROVEMENT OF MOLDING METHOD FOR CLOTHES POLYESTER-IZOCIANATE COMPOSITES

Merab Datuashvili
Kutaisi State University A. Tsereteli

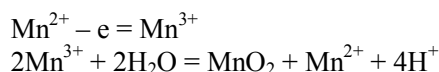
SUMMARY

Of the article discussed the creation of parts of sewing product of polyether-izocianate composites molding method. The result of organoleptic evaluation of manufactured prototypes set that: surface damage of molded parts are the result of the reaction between izocianatom and lubricants substance; heterogeneity and air bubbles due process fill manufactured mixture in form. Based on data from the experiment set temperature curing molded parts made of polyester-izocianate composites.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ПОРОШКОВ ДИОКСИДА МАРГАНЦА В ПРИСУТСТВИИ САХАРОЗЫ

Г.А.Цагарели, Н.Г.Майсурадзе, Л.Г.Бацанадзе, А.Г.Шакаришвили, Ш.М.Махатадзе
Тбилисский государственный университет им.Иване Джавахишвили
Институт неорганической химии и электрохимии им.Р.И.Агладзе

Современный способ получения диоксида марганца (ДМ) предусматривает его электро-осаждение в виде крупнокристаллического, плотно пристающего к поверхности инертного анода, осадка из раствора сульфата марганца и серной кислоты при 90° [1-4]. Существует и другой способ получения ДМ в виде порошка, образуемого в объёме раствора при низкой температуре и высоких концентрациях электролита [5-7]. Упрощённо образование порошка можно представить в виде двух последовательно протекающих реакций. На первой стадии у поверхности электрода происходит образование частицы Mn^{3+} , которая диффундирует в глубь раствора, где происходит вторая стадия – реакция диспропорционирования



Образование диоксида марганца по этому механизму становится возможным при высокой концентрации кислоты в растворе электролита. В этих условиях равновесие реакции диспропорционирования сильно смещается в левую сторону, ДМ не успевает осадиться на электроде и ионы Mn^{3+} переходят в раствор. Однако, полученный этим способом порошок ДМ не обладает активностью, необходимой для источников тока. В ранее проведенной работе по получению мелкодисперсного порошка ДМ в объёме электролизёра при низкой температуре и высоких плотностях тока использовали добавки хромата аммония, поливинилового спирта и анилина к раствору электролита. Выбор этих веществ был обусловлен увеличением ёмкости тонких плёнок ДМ, полученного в присутствии указанных компонентов. Все испытанные добавки увеличивали ёмкость ДМ в щелочных элементах. Однако, она была меньше ёмкости элементов, приготовленных с использованием заводских образцов ДМ [8].

С целью выявления эффективной добавки, повышающей электрохимическую активность порошка ДМ для химических источников тока, был исследован ряд веществ методом поляризационных кривых. Опыты проводили в трёхэлектродной ячейке, рабочим электродом служила платиновая проволока диаметром 1 мм, площадью $0,2 \text{ см}^2$; вспомогательным электродом – платиновая пластина, а электродом сравнения – ртуть-сульфатный электрод. Наилучший результат получили при исследовании сахарозы.

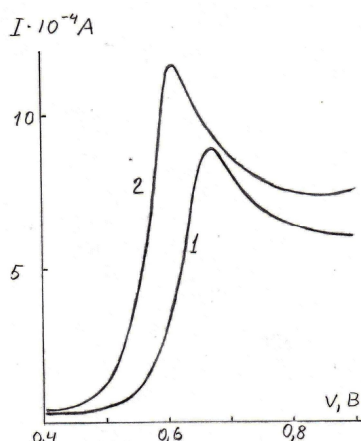


Рис.1. Вольтамперные кривые окисления иона Mn^{3+} в растворе 2,3 моль/л $MnSO_4$ + 2 моль/л H_2SO_4 : 1 – без добавки; 2 – добавка 1 г/л сахарозы

На рис. 1 приведены вольтамперные кривые, снятые в рабочем растворе, обычно применяемом в макроэлектролизе для получения порошка ДМ: 2,3 моль/л $MnSO_4$ + 2 моль/л H_2SO_4 . Кривая 1 получена в растворе без добавок, а кривая 2 – в присутствии 1 г/л сахарозы. Как видно из рисунка, поляризационная кривая, снятая в присутствии сахарозы, сдвинута в катодную сторону, а ток в пике увеличился. Облегчение электрохимического окисления ионов Mn^{2+} , по всей видимости, можно

объяснить образованием комплексов ионов Mn^{2+} с сахарозой, приводящем к уменьшению энергии активации электрохимической реакции.

В таблице 1 приведены результаты препаративного электролиза по получению мелкодисперсных порошков ДМ. Приготовленные порошки испытывали в щелочных элементах, которые разряжали до 0,9 В в гальваностатическом режиме током в 50 мА. Условия электролиза и изготовление щелочных элементов подробно описаны в работе [8].

Таблица 1. Выход по току продукта при электросинтезе ДМ и время разряда щелочного элемента
Условия электролиза: 300 г/л $MnSO_4$ + 200 г/л H_2SO_4 ; $I = 0,08$ А/см²; $t = 30^\circ C$.

Концентрация сахарозы, г/л	Выход по току ДМ, %	Время разряда элемента, мин.
без добавки	57,5	90
0,25	94,4	100
0,50	62,4	120
0,75	70,4	160
1,00	66,0	170
2,00	71,0	150
5,00	42,7	170

Время разряда гальванического элемента пропорционально его ёмкости. Из таблицы следует, что 1 г/л является оптимальной концентрацией сахарозы в рабочем растворе для получения порошка ДМ с учётом выхода продукта по току. Ёмкость элемента в этих условиях почти в 2 раза превышает ёмкость элементов с ДМ, полученного без добавки сахарозы. Для промышленных образцов ДМ 140 минут разряда считают нормальным показателем активности. Полученный нами оптимальный образец превосходит эту норму на 20%.

В заключении следует сказать, что в момент получения многих материалов высокая химическая активность со временем уменьшается. Полученные нами образцы подверглись повторному испытанию через 14 месяцев их хранения в обычных условиях, при этом ёмкость щелочных элементов практически не изменилась.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Джапаридзе Л.Н. Электролитический диоксид марганца, Тбилиси, 1987, с.43.
2. K. Takahashi, *Electrochim. Acta*, 1981, v.26, p.1467.
3. A. Kozawa, *Electrochemistry of manganese dioxide and manganese dioxide batteries in Japan*, Cleveland, 1973, p.57.
4. S. Nijjer, J.Thonstad, G.M. Haarberg, *Electrochim. Acta*, 2000, v.46, p.395.
5. В.П. Ильинский, Н.П. Лапин; Журн. Прикл. Химии; 1931, т.4, с.757.
6. Paul R.L. and Cartwright A., *J. Electroanal. Chem.*, 1986, v.201, p.113.
7. Фиошин М.Я. Успехи в области электросинтеза неорганических соединений, Москва, 1974, с.120.
8. Г.А. Цагарели, Н.Г. Майсурадзе, Л.И. Бацანадзе, А.Г. Шакаришвили, Ш.М. Махатадзе, *Известия НАН Грузии*, 2010, т.36, с.19.

საქართველოს თანამშრომლობის მანგანუმის დიოქსიდის ფხვნილის მიღების ელექტროქიმიური მეთოდი

გიორგი ცაგარელი, ნინო მაისურაძე, ლიანა ბაცანაძე, ამალია შაქარიშვილი, შოთა მახათაძე
ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
რაფელ აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი
რეზიუმე

მანგანუმის დიოქსიდის წვრილდისპერსული ფხვნილები დენის ქიმიური წყაროებისათვის მიღებული იყო ხსნარში მანგანუმის სულფატისა და გოგირდმჟავას მაღალ კონცენტრაციაზე, შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე და მაღალი დენის სიმკვრივის პირობებში. ხსნარში დანამატის სახით ვიყენებდით საქაროზას. მიღებული მანგანუმის დიოქსიდის ფხვნილი ხასიათდება მაღალი ელექტროქიმიური აქტიურობით.

ELECTROCHEMICAL METHOD OF PREPARATION OF MANGANESE DIOXIDE POWDER AT PRESENCE OF SACCHAROSE

Giorgi Tsagareli, Nino Maisuradze, Liana Batsanadze, Amalia Shacarishvili, Shota Makhatadze
Ivane Javkhishvili Tbilisi State University
Rafael Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry

SUMMARY

Fine-dispersed powders of manganese dioxide for chemical current sources were prepared in the conditions of high concentration of manganese sulfate and sulphuric acid at low temperature and at high current density. Saccharose was used as an additive. Prepared powder of manganese dioxide is characterized by high electrochemical activity.

მისალოცი



საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების აკადემიკოს-მდივანს, ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორს, პროფესორს, მეცნიერების დამსახურებულ მოღვაწეს, საქართველოსა და უკრაინის სახელმწიფო პრემიების ლაურეატს, ღირსების ორდენის კავალერს, კიევის უნივერსიტეტის საპატიო დოქტორს, თანამედროვეობის თვალსაჩინო მეცნიერს

გივი ცინცაძეს

შეუსრულდა დაბადებიდან 80 და სამეცნიერო-პედაგოგიური მოღვაწეობის 55 წელი

ღრმად პატივცემულო ბატონო გივი,

ბატონი გივი ცინცაძე არის გამოჩენილი პედაგოგი, მეცნიერი, და საზოგადო მოღვაწე, რომელმაც განვლილი წლები უნაგაროდ მიუძღვა საქართველოში განათლებისა და მეცნიერების განვითარებას. დიდა გივი ცინცაძის დამსახურება საქართველოში საინჟინრო კადრების მომზადების საქმეში. სახელმწიფო პოლიტექნიკური ინსტიტუტისა და შემდგომში საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ჯერ ანალიზური ქიმიის კათედრისა და შემდგომში ზოგადი და არაორგანული ქიმიის კათედრის ხელმძღვანელობის პერიოდში, მისი მონაწილეობით აღიზარდა მრავალი ინჟინერი, ქიმიკოსი-პედაგოგი და ქიმიკოსი-კვლევარი, რომლებიც წარმატებით მოღვაწეობენ როგორც საქართველოში, ასევე საზღვარგარეთ.

განსაკუთრებულ ყურადღებას იმსახურებს გივი ცინცაძის წვლილი საშუალო სკოლისათვის ქიმიის სახელმძღვანელოების შექმნის საქმეში. მისი თანაავტორობით შექმნილია VII-X კლასების სახელმძღვანელო და ამოცანებისა და სავარჯიშოების კრებული VII-XI კლასებისათვის.

ბატონი გივი ცინცაძე – მეცნიერების აღიარებული ორგანიზატორია, მისი სამეცნიერო ხელმძღვანელობით და კონსულტაციით მომზადებული და დაცულია ორმოცდაათზე მეტი საკანდიდატო და სადოქტორო დისერტაცია.

მის მიერ განვლილი ცხოვრების გზა სამაგალითოა ჩვენი ახალგაზრდობისათვის: საშუალო სკოლის ოქროს მედალი და თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის დიპლომი წარჩინებით; საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის ა. ჯანელიძის სახელობის გეოლოგიის ინსტიტუტის მეცნიერ თანამშრომელი; 1960 წლიდან საქართველოს პოლიტექნიკური ინსტიტუტის ასპირანტი; 1961 წლიდან სსრ კავშირის მეცნიერებათა აკადემიის ნ. კურნაკოვის სახელობის ზოგადი და არაორგანული ქიმიის ინსტიტუტის მიმაგრებული ასპირანტი, რაც 1965 წელს კოორდინაციულ ქიმიაში საკანდიდატო დისერტაციის წარმატებული დაცვით დამთავრდა.

გივი ცინცაძის მიერ პოლიტექნიკურ ინსტიტუტში შეიქმნა კრისტალოქიმიის, რენტგენოსტრუქტურული ანალიზისა და ბიოარაორგანული ქიმიის საკვლევი ლაბორატორიები, რომლებმაც შემდგომში მნიშვნელოვანი როლი შეასრულეს ლითონების არაორგანული და კოორდინაციული ნაერთების სინთეზისა და კვლევის მიმართულების განვითარების საქმეში. დამყარებული იქნა მჭიდრო სამეცნიერო კონტაქტები კოორდინაციული ნაერთების კვლევის ისეთ აღიარებულ სამეცნიერო ცენტრებთან, როგორცაა ტ. შევჩენკოს სახელობის კიევის სახელმწიფო უნივერსიტეტი და რუსეთის მეცნიერებათა აკადემიის ნ. კურნაკოვის სახელობის ზოგადი და არაორგანული ქიმიის ინსტიტუტი.

1971 წელს, გივი ცინცაძის მიერ თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში წარმატებით იქნა დაცული სადოქტორო დისერტაცია თემაზე "ლითონების ციანატური,

თიოციანატური და სელენოციანატური ნაერთების გამოკვლევა”, რომელსაც მაღალი შეფასება მისცა ცნობილმა მეცნიერმა მ. პორაი-კოშიცმა.

გივი ციცცაძის ნაშრომებმა მნიშვნელოვანი წვლილი შეიტანეს საერთაშორისო მაშტაბით კოორდინაციული ქიმიის განვითარების საქმეში. განსაკუთრებულ ყურადღებას იმსახურებს გამოკვლევები ზოგიერთი გარდამავალი ლითონის როდანიდული და სელენოციანატური კლასის ნაერთების კრისტალოქიმიის სფეროში, იზოციანატისა და ნიტროზო ჯგუფების ლითონებთან კოორდინირების განსაზღვრის სპექტროსკოპული კრიტერიუმები, ლითონების ფსევდოჰალოგენიდური კოორდინაციული ნაერთების სინთეზის ახალი მეთოდები, ფსევდოჰალოგენიდური ნაერთების კლასიფიკაცია კომპლექსწარმოქმნელი და სტრუქტურული თვისებების მიხედვით. კომპლექსური ნაერთების ქიმიაში კვლევის კვანტურ-ქიმიური მეთოდების დანერგვამ გაამდიდრა მეცნიერების ეს მნიშვნელოვანი დარგი.

გივი ციცცაძის გამოკვლევების საფუძველზე ჩამოყალიბდა ლითონების ფსევდოჰალოგენიდური კომპლექსნაერთთა ქიმია.

აღსანიშნავია გივი ციცცაძის გამოკვლევები ახალი ბიოკომპლექსების სინთეზისა და შესწავლის, კოორდინაციული ნაერთების კრისტალური სტრუქტურის რენტგენოსტრუქტურული მეთოდით შესწავლის მიმართულებით. ამ გამოკვლევებმა საფუძველი ჩაუყარა ლითონების ბიოარაორგანული ნაერთების კრისტალოქიმიის განვითარებას. მნიშვნელოვანი სამეცნიერო მიღწევაა ხისტი-რბილი მჟავების და ფუძეების კონცეფციის ახალ საფეხურზე წამოწევა, რომელმაც ცნობილი მეცნიერების მაღალი შეფასება დაიმსახურა.

გივი ციცცაძეს უყურადღებოდ არ დაუტოვებია ისეთი სამეცნიერო პრობლემები, როგორცაა ლანთანიოიდების ქიმია, სტიბიუმის სულფიდის მიღების ახალი ტექნოლოგია, ოქროს და პალადიუმის განსაზღვრის მეთოდის გაუმჯობესება, ინდიუმისა და კადმიუმის სორბციული ქცევა ანიონიტების როდანიდულ ფორმებზე და სხვ.

მისი სამეცნიერო ხელმძღვანელობით შესრულებული გამოკვლევების შედეგები თავმოყრილია გამოცემულ მონოგრაფიებში, რომლებიც სამაგიდო წიგნებს წარმოადგენენ ამ დარგში მომუშავე სპეციალისტებისათვის.

გივი ციცცაძე ბრძანდება წარმატებული ხელმძღვანელი. ამაზე მეტყველებს საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური და ბიოლოგიური ტექნოლოგიების სასწავლო-სამეცნიერო ინსტიტუტის დირექტორისა და ინსტიტუტის ქიმიური და ბიოლოგიური ტექნოლოგიების ფაკულტეტად გარდაქმნის შემდეგ, ამავე ფაკულტეტის დეკანის პოსტზე მუშაობისას მიღწეული წარმატებები. 1983 წელს ბატონი გივი არჩეული იყო საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის წევრ-კორესპონდენტად, 1993 წელს – ნამდვილ წევრად, 2007 წელს – ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების აკადემიკოს-მდივნად.

გივი ციცცაძის მაღალ სამეცნიერო დონეზე და ავტორიტეტზე მეტყველებს ისიც, რომ იგი მრავალი წლის მანძილზე იყო სსრკ მეცნიერებათა აკადემიის კოორდინაციული ნაერთებისა და არაორგანული ქიმიის სამეცნიერო საბჭოს კოორდინაციული ნაერთების სექციების წევრი, საქართველოს მეცნიერებისა და ტექნიკის სახელმწიფო კომიტეტთან არსებული რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის რესპუბლიკური საბჭოს თავმჯდომარე და საქართველოს სსრ უმაღლესი და საშუალო სპეციალური განათლების სამინისტროს სარედაქციო-საგამომცემლო საბჭოს ქიმიის სექციის თავმჯდომარე.

დიდაა გივი ციცცაძის წვლილი ჟურნალების „საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია“, „საქართველოს ქიმიური ჟურნალი“, „მეცნიერება და ტექნოლოგიები“ როგორც სარედაქციო კოლეგიის წევრის.

წლების განმავლობაში გივი ციცცაძე ნაყოფიერ სამეცნიერო მუშაობას ეწეოდა პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტის და რაფიელ აგლაძის ელექტროქიმიისა და არაორგანული ქიმიის ინსტიტუტებში.

მნიშვნელოვანი წვლილი აქვს შეტანილი ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის, პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტის, რაფიელ აგლაძის ელექტროქიმიისა და არაორგანული ქიმიის ინსტიტუტის და საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ხარისხების მიმნიჭებელი საბჭოების მუშაობაში.

გივი ცინცაძის მრავალწლიანმა ნაყოფიერმა პედაგოგიურმა მუშაობამ საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტში, ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტსა და სხვა უმაღლეს სასწავლებლებში ხელი შეუწყო ახალგაზრდა მაღალკვალიფიციური კადრების მომზადებას.

განსაკუთრებით აღსანიშნავია ის, რომ გივი ცინცაძემ შექმნა ბრწყინვალე ოჯახი, არის ყურადღებიანი მამა და ბაბუა და დიდი სიყვარულით ინახავს უდროოდ წასული მეუღლის ხსოვნას. ბატონო გივი, გილოცავთ დაბადების დღეს. გისურვებთ ჯანმრთელობას, ბედნიერებას თქვენს დიდ ოჯახთან ერთად და ახალ წარმატებებს სამეცნიერო და საზოგადოებრივ საქმიანობაში. გისურვებთ იმ დიდი ენერჯის შენარჩუნებას, რომელიც თქვენ ასე ჭარბად გაქვთ და რაც ასე სჭირდება დღეს საქართველოში ქიმიური მეცნიერების შემდგომ განვითარებას.

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის
ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების განყოფილება

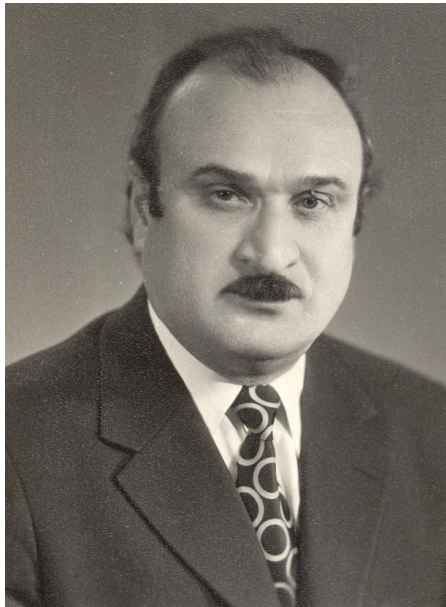
ჟურნალ „მაცნე, ქიმიის სერიის“ სარედაქციო კოლეგია

CONGRATULATION

Department of Chemistry and Chemical Technologies of the Georgian National Academy of Sciences, and Editorial Board of the Proceedings of the Georgian National Academy of Sciences congratulates Givi Tsintsadze, wonderful person, outstanding scientist and teacher, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician-Secretary of Department of Chemistry and Chemical Technologies of Georgian National Academy of Sciences, with jubilee of 80th anniversary and 55 years of fruitful scientific and pedagogical work.

ПОЗДРАВЛЕНИЕ

Отделение химии и химических технологий Национальной Академии наук Грузии и редакционная коллегия химической серии Известий Национальной Академии наук Грузии поздравляют известного ученого и педагога, доктора химических наук, профессора, академика-секретаря отделения химии и химических технологий Национальной Академии наук Грузии Гиви Васильевича Цинцадзе со славным юбилеем – 80-летием со дня рождения и 55-летием плодотворной научной, творческой и педагогической деятельности.



გივი ზვიადაძის ხსოვნა

უკვე ერთი წელი შესრულდა რაც ჩვენგან წავიდა ღვაწლმოსილი მეცნიერი, დიდი მამულიშვილი, ბატონი გივი ზვიადაძე. ძნელია მის დამსახურებაზე ილაპარაკო, რადგან რადგან მნიშვნელოვანია კვლევათა შედეგები, რომელიც მან დაგვიტოვა თავისი ხანგრძლივი, აქტიური მოღვაწეობის წყალობით. ისი ცხოვრების გზა არ ყოფილა იავარდებით მოფენილი. მან თავისი ნიჭისა და უდიდესი შრომისმოყვარეობით სერიოზულ მწვერვალებს მიაღწია მეცნიერებაში. ბატონი გივი დაიბადა 1927 წელს ქ. თბილისში, პედაგოგის ოჯახში. 1945 წელს წარმატებით დაამთავრა სკოლა და ჩაირიცხა საქართველოს პოლიტექნიკურ ინსტიტუტში, რომელიც ასევე წარმატებით დაასრულა 1950 წელს და მიენიჭა ინჟინერ ქიმიკოსის კვალიფიკაცია. შემდგომში, 1950-53 წლებში ბატონი გივი ზვიადაძე სწავლობდა მოსკოვის ფერადი მეტალების და ოქროს ინსტიტუტის ასპირანტურაში. ასპირანტურის დამთავრებისთანავე მან ტექნიკურ მეცნიერებათა კანდიდატის ხარისხის მოსაპოვებლად აქვე დაიცვა დისერტაცია. ასპირანტურაში სწავლის პერიოდში მისი ხელმძღვანელები იყვნენ ცნობილი მეცნიერები ა. ელიაევი და ვ. აზუხინი, რამაც მნიშვნელოვანწილად განაპირობა მისი როგორც მაღალი კლასის მეცნიერის ჩამოყალიბება. ასპირანტურის დამთავრების შემდეგ მან მოღვაწეობა განაგრძო საბჭოთა კავშირის მეცნიერებათა აკადემიის მეტალურგიის ინსტიტუტში, სადაც გაიარა ყველა თანამდებობრივი საფეხური უმცროსი მეცნიერი თანამშრომლიდან ლაბორატორიის გამგემდე. 1968 წელს ბატონმა გივიმ ამავე ინსტიტუტში დაიცვა სადოქტორო დისერტაცია. 1960 წელს იგი მოწვეული იქნა საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის პრეზიდენტის მიერ საქართველოს მეტალურგიის ინსტიტუტში, სადაც მან დაარსა ფერადი და კეთილშობილი ლითონების ლაბორატორია. 1974 წელს ბატონი გივი ზვიადაძე მიიწვიეს საბჭოთა კავშირის მეცნიერებათა აკადემიის მეტალურგიის ინსტიტუტში ფერადი ლითონების ლაბორატორიის ხელმძღვანელად, სადაც აქტიურ სამეცნიერო და საზოგადოებრივ მუშაობას ეწეოდა 1987 წლამდე. იგი იყო რამდენიმე ინსტიტუტის სადისერტაციო საბჭოს წევრი, კონსულტაციებს უწევდა რეგიონების შესაბამისი პროფილის ინსტიტუტების თანამშრომლებს. მისი ორგანიზატორობით ჩატარდა რამდენიმე

საერთაშორისო კონფერენცია, როგორც თბილისში ასევე საბჭოთა კავშირის სხვა ქალაქებში. იყო ქიმიისა და მეტალურგიის რეფერატული ჟურნალის სარედაქციო კოლეგიის წევრი, ხელმძღვანელობდა ფერადი მეტალურგიის სექციას.

1987 წელს ბატონი გივი ზვიადაძე საქართველოს მთავრობის დადგენილებით გადმოყვანილი იქნა პროფესორად საქართველოს ტექნიკურ უნივერსიტეტში, სადაც 1995 წელს მან პირველად საქართველოში ჩამოაყალიბა ფერადი ლითონების მეტალურგიის კათედრა, რომელსაც თვითონვე ხელმძღვანელობდა 1997 წლამდე.

იგი შეთავსებით აქტიურ სამეცნიერო მუშაობას ეწეოდა კავკასიის მინერალოგიური ნედლეულის ინსტიტუტში, სადაც ხელმძღვანელობდა ტექნოლოგიური მიმართულების სამუშაოებს, იყო განყოფილების გამგე და ინსტიტუტის დირექტორის მოადგილე

2008 წლიდან სიცოცხლის ბოლომდე ბატონი გივი მუშაობდა მის მიერ ჩამოყალიბებულ ფერადი ლითონების მეტალურგიის მიმართულებაზე სრულ პროფესორად.

მისი ხელმძღვანელობით დაცულია რამდენიმე ათეული საკანდიდატო და სადოქტორო დისერტაცია, როგორც საქართველოში, ასევე ყოფილი საბჭოთა კავშირის სხვა რესპუბლიკებშიც.

ბატონი გივი ზვიადაძე იყო საქართველოს საინჟინრო აკადემიის ნამდვილი წევრი.

ბატონი გივი იყო უაღრესად განათლებული და შრომისმოყვარე, ტაქტიანი და ყურადღებიანი, ამასთანავე მომთხოვნი, როგორც საკუთარი თავის ასევე თანამშრომელთა მიმართ. იგი გამოირჩეოდა პრინციპულობითა და სამართლიანობით, უზომოდ იყო შეყვარებული თავის ქვეყანაზე.

დიდა მისი გარდაცვალებით გამოწვეული დანაკლისი როგორც ოჯახის, ასევე საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის, ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის და ქართული საინჟინრო საზოგადოებისათვის.

გამოჩენილი მეცნიერი და პედაგოგი, მაღალი ზნეობრივი პრინციპების მქონე პიროვნება, შესანიშნავი კოლეგა და ერთგული მეგობარი – აი ასეთი დარჩება გივი ზვიადაძე მისი კოლეგებისა და მეგობრების ხსოვნაში.

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის
ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტი

საქართველოს საინჟინრო აკადემია

IN MEMORY

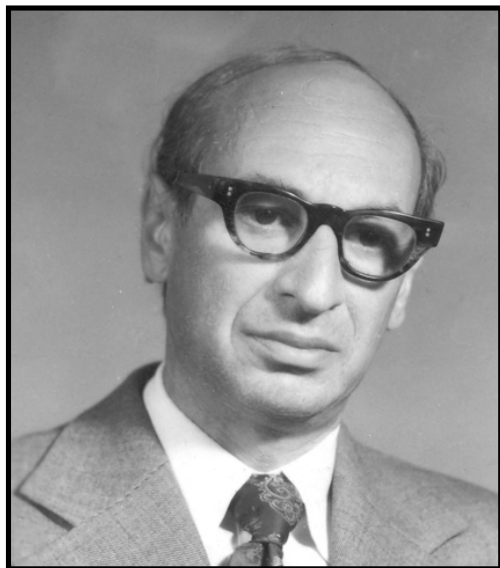
One year passed, that died well known Georgian scientist, founder of the non-ferrous metals metallurgy cathedra at the Georgian Technical University, Member of the Georgian Engenerial Academy, Professor Givi Zviadadze.

ВОСПОМИНАНИЕ

Уже год, как ушёл из жизни видный грузинский ученый, основатель кафедры металлургии цветных металлов Грузинского технического университета, член Инженерной академии Грузии, профессор Гиви Звиаддзе.

გარდაიცვალა საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის აკადემიკოსი, საქართველოს სახელმწიფო და პეტრე მელიქიშვილის სახელობის პრემიების ლაურეატი, პროფესორი

კოხტა ჯაფარიძე



საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის აკადემიკოსი, საქართველოს სახელმწიფო და პეტრე მელიქიშვილის სახელობის პრემიების ლაურეატი, პროფესორი კოხტა ჯაფარიძე დაიბადა 1929 წლის 4 მაისს ქ. ონში, პროფესორ გიორგი ჯაფარიძის და თინათინ ჩიკვაძის ოჯახში. 1947 წ. კოხტა ჯაფარიძემ წარმატებით დაამთავრა თბილისის ვაჟთა მე-2 საშუალო სკოლა და შევიდა თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ქიმიის ფაკულტეტზე, რომელიც წარჩინებით დაამთავრა ორგანული ქიმიის სპეციალობით 1952 წელს. ამავე წელს ჩაირიცხა საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის პ.მელიქიშვილის სახ. ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტის ასპირანტურაში და მივლინებულ იქნა ქ. მოსკოვში, სსრკ მეცნიერებათა აკადემიის ფიზიკური ქიმიის ინსტიტუტში. 1955 წ. დაამთავრა ასპირანტურის კურსი პროფ. ნ. შიშაკოვის ხელმძღვანელობით.

კ. ჯაფარიძის პირველი ნაშრომები მიეძღვნა სილიციუმორგანული ნაერთების სტრუქტურის დადგენის საკითხებს. მან პირველმა სსრკ-ში გამოიყენა ელექტრონების დიფრაქციის მეთოდი აირად ფაზაში ორგანული ნაერთების მოლეკულათა გეომეტრიული აგებულების განსასაზღვრად. 1956 წ. დაიცვა საკანდიდატო დისერტაცია თემაზე: “ზოგიერთი ციკლური სილიციუმორგანული ნაერთის მოლეკულების სტრუქტურის ელექტრონოგრაფიული კვლევა”. კ. ჯაფარიძის მიერ მიღებული სტრუქტურული მონაცემები არაერთხელ მოიხსენიება სილიციუმორგანული ნაერთებისადმი მიძღვნილ სტატიებსა და მონოგრაფიაში (მაგ. აკად. ა. პეტროვის და თანაავტორების მონოგრაფიებში «Синтез кремнийорганических мономеров», Изд. АН СССР, М.1961, ст. 426, რომელშიც განხილულია კ. ჯაფარიძის მიერ ჩატარებული კვლევის შედეგები).

შემდეგ კოხტა ჯაფარიძე მუშაობდა თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში ჯერ ასისტენტად, შემდეგ დოცენტად, პ.მელიქიშვილის სახ. ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტში ჯერ უმცროს მეცნიერ თანაშრომლად და შემდეგ უფროს მეცნიერ თანაშრომლად, წლების მანძილზე კითხულობდა ლექციების კურსს თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში.

1961 წლიდან – სიცოცხლის უკანასკნელ დღემდე კოხტა ჯაფარიძე მუშაობდა საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის კიბერნეტიკის ინსტიტუტში, 1962 წლიდან წლების მანძილზე იყო დირექტორის მოადგილე სამეცნიერო ნაწილში. მისი სამეცნიერო მოღვაწეობა მიმართულია იმ ნივთიერებათა და მასალათა მიღების, გამოკვლევისა და გამოყენებისადმი, რომლებიც ქმნიან კიბერნეტიკული სისტემების დამუშავების ახალი პრინციპების შექმნის საფუძვლებს.

აკადემიკოს კ. ჯაფარიძის ხელმძღვანელობით შესრულებულია 9 საკანდიდატო და 3 სადოქტორო დისერტაცია. ფართო პროფილის ქიმიკოსმა კ. ჯაფარიძემ მნიშვნელოვანი წვლილი შეიტანა ახალ მიმართულებებში, რომლებიც წარმატებით ვითარდება წლების მანძილზე კიბერნეტიკის ინსტიტუტში. მან პირველმა საქართველოში დაიწყო ორგანულ ნაერთთა ფოტოქიმიური კვლევა, კერძოდ, შექცევადი ფოტოქიმიური პროცესების შესწავლა. კ. ჯაფარიძის მეცნიერული ინტერესები მოიცავდა ნივთიერებათა სინთეზს, მათი აღნაგობის მახასიათებლების კვლევას თანამედროვე მეთოდების გამოყენებით და აგრეთვე ქიმიური პროცესების და სისტემების მოდელირების საკითხებს.

პეტროციკლების სტრუქტურის შესწავლის გამოცდილებამ, რომელიც მოიცავდა მოდელირებას და მათემატიკურ გათვლებს, განაპირობა კ. ჯაფარიძის ინტერესი ქიმიური პროცესების და

სისტემების საკითხებისადმი და სპიროქრომენების მოლეკულის ჰეტეროციკლური ფრაგმენტების აგებულების გავლენის შესწავლისადმი მათ ფოტოქიმიურ, თერმოდინამიკურ, კინეტიკურ და სპექტრულ მახასიათებლებზე.

კ. ჯაფარიძემ შეასრულა საინტერესო სამუშაო ქიმიური რეაქციების მოდელირების საკითხზე, რომელშიც ნაჩვენებია რეაქციების სტატისტიკურ-ალბათური მოდელირების შესაძლებლობა არაგანშტოებული ქიმიური რეაქციის მაგალითზე. კ. ჯაფარიძემ თანამშრომლებთან ერთად გამოაქვეყნა ორი სამუშაო თვისებითი ქიმიური ანალიზის მათემატიკური მოდელირების საკითხებზე.

კ. ჯაფარიძის სამეცნიერო შრომებიდან უმნიშვნელოვანესია სამუშაოთა ციკლი, რომელიც მოიცავს სპიროპირანების (სპიროქრომენების) სინთეზისა და გამოკვლევის საკითხებს. ამ სამუშაოთა ნაწილი შესრულდა საფრანგეთში ფიზიკურ-ქიმიური ბიოლოგიის ინსტიტუტში (პარიზი), სადაც კ. ჯაფარიძე იმყოფებოდა ხანგრძლივ სამეცნიერო მივლინებაში. (ამ კვლევის შედეგები გამოქვეყნდა ჟურნალში “Comptes Rendus Acad. Sc.”), ხოლო ძირითადი კვლევები ჩატარდა კიბერნეტიკის ინსტიტუტში. კ. ჯაფარიძის სადოქტორო დისერტაციაში თავმოყრილი და განზოგადოებულია სპიროპირანების სინთეზისა და თვისებების კვლევისადმი მიძღვნილი ავტორისა და მისი მოწაფეების შრომები. იგი წარმოადგენს ფუნდამენტურ და ამომწურავ შრომას, რომელიც მიმართულია კარდინალური ამოცანის გადასაწყვეტად – სრულყოფილი ფოტოქრომული სისტემების შესაქმნელად. ასეთი რთული ამოცანის გადაჭრა მოითხოვდა ავტორისაგან კვლევის თანამედროვე მეთოდების მთელი არსენალის გამოყენებას, კერძოდ, სპექტროსკოპიას სპექტრის ულტრაიისფერ, ხილულ და ინფრაწითელ უბნებში, ბ.მ.რ. და მას-სპექტროსკოპიას, ფოტოქიმიური და კინეტიკური მეთოდების გამოყენებას, ფართო მიზანდასახული სინთეზის ჩატარებას. უნდა აღინიშნოს, რომ პროფ. კ. ჯაფარიძემ, რომელიც კარგად ფლობს თანამედროვე ორგანული სინთეზის მეთოდებს, ნაყოფიერი შრომა გასწია სპიროქრომენების ყოველმხრივი შესწავლის დარგში.

კ. ჯაფარიძემ თანამშრომლებთან ერთად მიიღო რამდენიმე ასეული სპიროქრომენი და ჩაატარა მათი მრავალმხრივი გამოკვლევა. პირველად იქნა შესწავლილი ინფრაწითელი და ბირთვული მაგნიტური რეზონანსის (ბმრ) სპექტრების ცვლილება ფოტოქრომული ციკლის დროს. ინფრაწითელ და ბ.მ.რ. სპექტრების საფუძველზე დადგინდა სპიროქრომენის მოლეკულის აღნაგობის ზოგიერთი დეტალი და აგრეთვე კავშირი სპექტრულ მახასიათებლებსა და სპიროქრომენების სტაბილურობას შორის. პირველად ჩატარდა დაკვირვება სპიროქრომენების ფოტოქრომია კრისტალურ და ამორფულ მდგომარეობაში. ელექტრონული სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგინდა, რომ სპიროქრომენების მრავალი თვისება განპირობებულია მოლეკულური ასოციაციებით. ნაჩვენებია, რომ არსებული წარმოდგენები სპიროქრომენების ქიმიურ და ფოტოქიმიურ გარდაქმნაზე მცდარია, რომ შექცევად გარდაქმნებს განიცდის ამ ნაერთების მხოლოდ შეფერილი ფორმა. მიკვლეულია სპიროქრომენების სინათლით სტაბილიზაცია, რაც განპირობებს ფოტოქრომული სისტემის მით უფრო მეტ სტაბილურობას, რაც უფრო ხანგრძლივ იქნებიან ისინი ხმარებაში. ნაჩვენებია, რომ სიმეტრიული სპიროქრომენების სინთეზისას წარმოიქმნება რიგი პროდუქტებისა, მათ შორის ფოტოქრომული ნივთიერებისა, რომლებიც შეცდომით ითვლებოდა სპიროქრომენების იზომერებად.

გაზვიადების გარეშე შეიძლება ითქვას, რომ თავისი გამოკვლევებით კ. ჯაფარიძემ შეიტანა მნიშვნელოვანი წვლილი ფოტოქრომიის შესწავლის საქმეში, განსაკუთრებით კი სპიროქრომენების თეორიის და გამოყენების დარგში. ყველა იმ მიმართულებით, რომელშიც აკად. კ. ჯაფარიძე ეწევა მეცნიერულ კვლევას, იგი პოულობს საკითხის გადაწყვეტის თავისებურ, ორიგინალურ გზას და ავლენს საკვლევი სისტემების ყველაზე ნატიფ კანონზომიერებებს. მიზანსწრაფულობამ და ლოგიკურობამ ამოცანის დასმასა და გადაწყვეტაში, მას საშუალება მისცა მაღალ, თანამედროვე დონეზე ჩატარებული კვლევების ყველა ასპექტი წარმოედგინა ერთიანი “იდეოლოგიის” საფუძველზე და ეჩვენებინა ფოტოქრომული ნაერთების ქცევის სრული სურათი სხვადასხვა ფიზიკურ პირობებში. ფოტოქრომული ნაერთების სინთეზისა და გამოკვლევის შედეგები ასახულია მონოგრაფიაში “სპიროქრომენები” (რუსულად, გამოცემლობა “მეცნიერება” 1979 წ.), რომელიც სამაგიდო წიგნად იქცა ამ დარგში მომუშავე სპეციალისტებისათვის.

მსოფლიოში მრავალი სამეცნიერო ცენტრი მუშაობს სპიროპირანების სინთეზისა და კვლევის დარგში მათი ნანოტექნოლოგიებში გამოყენების მიზნით. გამოდის ამ საკითხისადმი მიძღვნილი ასეულობით შრომა. მაგალითად, რუსეთის მეცნიერებათა აკადემიის 2008 წლის ანგარიშში ახალი ტიპის სპიროპირანების მიღება და კვლევა ერთერთ პრიორიტეტად არის მიჩნეული.

თვითორგანიზებადი სუპრამოლეკულური სისტემების შექმნის მიზნით, აკად. კ. ჯაფარიძის ხელმძღვანელობით, სპიროპირანები შეისწავლებოდა სხვადასხვა ტიპის გარემოში – თხევად და მყარ

მატრიცებში. განსაკუთრებით საინტერესო აღმოჩნდა კომპოზიციები, რომლებიც შედგება ქოლესტერული თხევადი კრისტალისა და სპიროპირანისაგან. ასეთ ნარევეში გარკვეულ პირობებში ხდება თვითორგანიზება და სუპრამოლეკულური სისტემის წარმოქმნა, რაც სპექტრის ხილულ უბანში ბრევის არეკვლის ზოლის ანომალურ თვისებებში ვლინდება. ფოტონდუქციის შედეგად სისტემა კარგავს ამ თვისებებს. მოვლენა აიხსნა სპიროპირანის გლობულარული მოლეკულების უნარით მოახდინონ ქოლესტერული თხევადი კრისტალის სეგრეგაცია. მეროცინანის კოპლანარულ მოლეკულებს ეს უნარი არ გააჩნია. მოვლენა დამტკიცდა გლობულარული და კოპლანარული აღნაგობის არაფოტოქრომული მოლეკულების თხევადკრისტალურ გარემოში შესწავლით. სპიროპირანის ნანონაწილაკების პრაქტიკაში გამოსაყენებლად სასურველია ფოტოქრომული კომპოზიციის მყარ გარემოში განთავსება კიბერნეტიკის ინსტიტუტში მიკვლევითი ეფექტის შენარჩუნებით. ამ მიზნით შემუშავებულია მიკროკაფსულირების მეთოდის სპეციალური ტექნოლოგია, რომლის საშუალებითაც პოლიმერულ მატრიცაში ხდება ფოტოქრომული თხევადკრისტალური კომპოზიციის მიკროკაფსულირება.

კოხტა ჯაფარიძის მეცნიერული ნაღვაწი ასახულია ასზე მეტ სამეცნიერო სტატიაში, 1 მონოგრაფიასა და 15 საავტორო მოწმობაში. იგი არჩეული იყო ევროპის ფოტოქიმიური საზოგადოების წევრად. ბატონი კოხტა ჯაფარიძე იყო შესანიშნავი მეცნიერი, ფრიად ერუდირებული და განათლებული, ჭეშმარიტი ინტელიგენტი და კარგი პიროვნება, იგი დიდი სიყვარულით და ღრმა პატივისცემით სარგებლობდა კოლეგებს, თანამშრომლებს და აღზრდილებს შორის.

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების განყოფილება, კიბერნეტიკის ინსტიტუტის კოლექტივი და ჟურნალ “მაცნე, ქიმიის სერიის” სარედაქციო კოლეგია ღრმა მწუხარებით იუწყება აკადემიკოს კოხტა ჯაფარიძის გარდაცვალების შესახებ და უთანაგრძნობს მის შვილებს, თამარის და გიორგის, ოჯახის სხვა წევრებს, მის ახლობლებს და მეგობრებს.

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის
ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების განყოფილება

კიბერნეტიკის ინსტიტუტი

ჟურნალ “მაცნე, ქიმიის სერიის” სარედაქციო კოლეგია

CONDOLENCE

Department of Chemistry and Chemical Technologies of the Georgian National Academy of Sciences, the staff of Institute of Cybernetics, and the Editorial Board of Proceedings of the Georgian National Academy of Sciences, chemical series, announce death of Professor Kohta Japaridze, well known scientist, Doctor of Chemical Sciences, Member of the Georgian National Academy of Sciences, and condolence to his family and intimates.

СОБОЛЕЗНОВАНИЕ

Отделение химии и химической технологий Национальной Академии наук Грузии, коллектив Института кибернетики и редакционная коллегия химической серии Известий Национальной Академии наук Грузии извещают о смерти известного учёного, доктора химических наук, профессора, заслуженного деятеля науки, академика Кохты Георгиевича Джапаридзе и выражают соболезнование семье и близким покойного.

ინფორმაცია ავტორებისათვის

ჟურნალი “საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე. ქიმიის სერია” აქვეყნებს სტატიებს ქიმიური მეცნიერების დარგში ქართულ, ინგლისურ და რუსულ ენებზე; მიმოხილვებისა და ინფორმაციული ხასიათის მასალების წარმოდგენა შესაძლებელია სარედაქციო კოლეგიასთან შეთანხმებით. გამოსაქვეყნებელი მასალის მოცულობა, ფორმატი და მისი წარმოდგენის სხვა პირობები შეთანხმებული უნდა იყოს პასუხისმგებელ მდივანთან, ავტორებმა ტექსტი უნდა წარმოადგინონ ელექტრონულ ფორმაში, Microsoft Word ფაილის (*.doc ან *.rtf) სახით, ნახაზები და სურათები – შავ-თეთრი გრაფიკული (*.bmp, *.dib, *.jpg, *.gif და სხვ.) ფაილების სახით. სამეცნიერო სტატიების ავტორების დასახმარებლად რედაქციის მიერ გათვალისწინებულია როგორც სტანდარტული ელექტრონული ფორმატები სამივე ენაზე, ისე სხვა ტექნიკური მომსახურება. Chemical Abstracts-სა (ინგლისურ ენაზე) და საქართველოს რეფერატულ ჟურნალში (ქართულ და ინგლისურ ენებზე) სტატიის რეფერირებისათვის ავტორი ვალდებულია გაითვალისწინოს შინაარსობრივი რეზიუმეების მომზადება ორივე ენაზე.

სარედაქციო კოლეგიასთან შეთანხმებული საფასური უნდა იყოს გადარიცხული საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ანგარიშზე “ლიბერთი” ბანკში № GE80LB0121115150495000, საიდენტიფიკაციო კოდი 203851536.

INFORMATION for AUTHORS

The journal “**Proceedings of the Georgian National Academy of Sciences. Chemical series**” is publishing articles in a field of chemical sciences in Georgian, English, and Russian, reviews and informational/advertising materials may be submitted after consultations with the Editorial Board. Volume, format, and other details of contribution are to be discussed with the Executive Secretary; Authors submit texts of articles in a form of Microsoft Word files (*.doc or *.rtf), figures and pictures – as monochrome (*.bmp, *.dib) or black/white (*.jpg, *.gif, etc.) files. To help Authors of scientific articles, standard Georgian, English, and Russian formats are provided as well as other technical service and support. For references of the article in the Chemical Abstracts (in English) and in the Georgian Abstracts Journal (in Georgian and in English) authors are obliged to foresight substantial summaries in both languages.

Agreed with the Editorial Board publishing expenses are to be paid at the Liberty Bank on the account of the Georgian National Academy of Sciences No GE80LB0121115150495000, identification code 203851536.

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ

Журнал "Известия Национальной Академии наук Грузии. Серия химическая" публикует статьи и краткие сообщения в области химических наук на грузинском, английском и русском языках; обзорные статьи и материалы информационного характера публикуются по предварительному согласованию с редакционной коллегией. Объем, формат и условия представления материала для публикации следует согласовать с ответственным секретарем; авторы должны представить тексты в виде файлов Microsoft Word (*.doc или *.rtf), а рисунки, чертежи и фотоснимки – в виде черно-белых графических (*.bmp, *.dib, *.jpg, *.gif и др.) файлов. Для оказания помощи авторам научных статей, редакция предусматривает стандартные электронные формы на всех трех языках, а также другую техническую поддержку. Для реферирования статьи в Chemical Abstracts (на английском языке) и Грузинском реферативном журнале (на английском и грузинском языках) авторам следует предусмотреть содержательные резюме на обоих языках.

Оплата расходов по публикации производится перечислением согласованной с коллегией суммы на счёт Национальной Академии наук Грузии в банке «Либерти» № GE80LB0121115150495000, идентификационный код 203851536.