

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIANNATIONALACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია

CHEMICAL SERIES

СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

| | |
|----------------|------------------|
| | ტომი |
| 2017 №1 | Volume 43 |
| | Том |

თბილისი – TBILISI – ТБИЛИСИ

საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე
PROCEEDINGS OF THE GEORGIANNATIONALACADEMY OF SCIENCES
ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК ГРУЗИИ

ქიმიის სერია

CHEMICAL SERIES

СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

ISSN – 0132 – 6074

2017 №1 **ტომი**
Volume 43
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 43 № 1

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

2017

სარედაქციო კოლეგია

გ.თავაძე, ი.ჟორდანია, შ.სამსონია, ე.ქემერტელიძე, გ.ცინცაძე, ვ.ციციშვილი (რედაქტორი),
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

E.Kemertelidze, I.Jordania, Sh.Samsoniya, G.Tavadze, 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

И.С.Жордания, Э.П.Кемертелидзе, Ш.А.Самсония, Г.Ф.Тавадзе, 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, OH43210-0012, USA, American Chemical Society
** LERL TECHINFORMI, <http://www.tech.org.ge>; www.tech.caucasus.net

შინაარსი

| | |
|--|----|
| ანალიზური ქიმია | |
| <i>ბ.გოგიჩაიშვილი, ი.დიდბარიძე, ნ.ბრეგაძე.</i> მიკროელემენტების განსაზღვრა საქართველოს მინერალურ წყლებში ქრომატოგრაფიული კონცენტრაციების მეთოდით* | 10 |
| არაორგანული ქიმია | |
| <i>ვ.რუხაძე, ი.ქაშუშაძე, მ.კუხალაშვილი.</i> ბარიუმის სულფატის სინთეზის პირობების გავლენა მის ხარისხობრივ მაჩვენებლებზე | 11 |
| ელექტროქიმია | |
| <i>თ.ჩაზუნაშვილი, თ.როყვა, ჟ.ქებაძე, მ.დადუნაშვილი, ზ.ვაწაძე, შ.მახათაძე, ნ.ბუთლიაშვილი.</i> ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდისა და წყალბადის მისაღები საცდელ-სადემონსტრაციო დანადგარის აწყობა და გამსხვილებული მასშტაბის ელექტროლიზური აბაზანის გამოცდა | 15 |
| <i>ც.გაგანიძე, ჟ.ქებაძე, მ.ბოლოთაშვილი, ლ.კაკურია, ქ.უგრელიძე.</i> ნახშირბადოვანი მასალების კათოდებად გამოყენების შესაძლებლობის კვლევა ელექტროლიტური მანგანუმის დიოქსიდის და წყალბადის ერთდროული მიღებისას* | 25 |
| ორგანული ქიმია | |
| <i>ი.ჯინიყაშვილი, მ.ციცავი, ქ.სარაჯიშვილი, ქ.ებრაღიძე, ვ.ციციშვილი.</i> პიროლოფტალაზინების სინთეზი | 26 |
| <i>ნ.ჩაგანავა, ლ.გოგუა.</i> ქალკონების ფარმაკოლოგიური თვისებების დამოკიდებულება სტრუქტურებზე | 30 |
| ფიზიკური ქიმია | |
| <i>შ.ანდლუაძე, ა.ბერეჟიანი, მ.ბერეჟიანი, გ.მჭედლიშვილი.</i> ფსევდოგათხევადებული შრის ჰიდროდინამიკის კომპიუტერული სიმულაცია გრანულირებული ბარიტების აღდგენის პროცესისთვის | 38 |
| <i>გ.ბეზარაშვილი, კ.სულაბერიძე, დ.ფეტვიაშვილი, ლ.ღურჭუმელია, მ.კეკელიძე.</i> ალის ჰეტეროგენული ინჰიბირების საკითხისათვის* | 46 |
| <i>რ.ჯანელიძე, ე.ციციშვილი.</i> ექსიტონის ფაქიზი სტრუქტურა დაბალი სიმეტრიის მქონე კვანტურ წერტილებში* | 56 |
| <i>ა.ფაშაევი, ო.დავარაშვილი, მ.ენუქაშვილი, ზ.ახვლედიანი, რ.გულიაევი, ლ.ბიჩკოვა, მ.მაგანა, ვ.ზლომანოვი.</i> A ^{IV} B ^{VI} ნახევარგამტარების დამაბული ნაწილებების დიელექტრიკულ საფენებზე კვლევა* | 69 |
| მათემატიკური ქიმია | |
| <i>ნ.კუპატაძე, ზ.მაჩაიძე, მ.ბელინაშვილი, მ.გვერდწითელი.</i> Ph ₄ P ⁺ იონის ძვრადობის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა სპირტხსნარებში | 70 |
| კომპლექსნაერთთა ქიმია | |
| <i>ნ.ორხიკიძე, თ.მათითაიშვილი, კ.დიდებულიძე, ე.ელიზბარაშვილი.</i> მაკროციკლური აზომეთინური ნაერთების Cr ³⁺ და Cu ²⁺ კომპლექსების სინთეზი და მათი ბაქტერიციდული თვისებების შესწავლა | 73 |
| მაღალმოკვლურ ნაერთთა ქიმია | |
| <i>ა.ფორჩხიძე.</i> პოლიმერების ცოცვადობა წყალხსნარებში დიფუზიური შეზღუდვის არარსებობის პირობებში | 77 |

* რეზიუმე

| | |
|--|-----|
| ნავთობის ქიმია | |
| <i>გ.ხიტირი, თ.გაბუნია, ზ.ამირიძე.</i> ზოგიერთი მოსაზრება მილსადენის ნარჩენის გამოყენების სფეროების შესახებ | 79 |
| ბიოორგანული ქიმია | |
| <i>ნ.შენგელია, ლ.ტაბატაძე, ზ.ფაჩულია, რ.გახოკიძე.</i> 2-β-D-გლუკოპირანოზილ-α-D-მანოპირანოზის სინთეზი | 81 |
| გარემოს ქიმია | |
| <i>ნ.კუჭავა.</i> ქიმიური ელემენტის ქრომის (Cr) წყალმცენარესთან <i>Spirulina platensis</i> ურთიერთქმედების შესახებ | 84 |
| <i>ო.რჩეულიშვილი, ლ.ტულუში, ე.გინტური, ე.კირკესალი, ა.რჩეულიშვილი.</i> ნიადაგიდან Cu, Mn, Cd, Zn-ის შეთვისებისა და განაწილების შესწავლა ხორბალსა და ქერში | 88 |
| აგრარული ქიმია | |
| <i>ლ.ჯაფარიძე, ც.გაბელია, ე.სალუქვაძე, ნ.ოსიპოვა, თ.კვერნაძე, ქ.ებრალიძე.</i> მოდიფიცირებული ასკან-თიხის მიღება და კვლევა | 93 |
| ბუნებრივ ნაერთთა ქიმია | |
| <i>მ.ბენიძე, ვ.ნებიერიძე, ა.სხირტლაძე, ე.ქემერტელიძე, მ.განცერა.</i> <i>Yucca gloriosa</i> L. ღეროების ზოგიერთი კომპონენტი* | 99 |
| ქიმიური ტექნოლოგია | |
| <i>მ.გვიანიძე, ე.შენგელია, ლ.გვასალია.</i> ქ. ბათუმის საკანალიზაციო სისტემის რეაბილიტაციის გაკვლევა წყალარინების გამწმენდი ნაგებობის მუშაობის ეფექტურობაზე | 100 |
| <i>შ.ანდლუაძე, გ.მჭედლიშვილი, ა.ბერეჟიანი.</i> მადნეულის სამთო გამამდიდრებელ კომბინატში რეციკლირების პროცესის გამოყენების შესაძლებლობა | 104 |
| <i>მ.ციცავაძე, მ.ჩხაიძე, მ.ხაჩიძე, მ.ბუზარიაშვილი, ქ.ებრალიძე, ვ.ციციშვილი.</i> ვაშლის კანიდან ფლავონოლების, ტრიტერპენოიდებისა და პექტინის საფეხურებრივი ექსტრაქციები | 107 |
| <i>რ.გოცირიძე, ნ.მხეიძე, ს.მხეიძე, ნ.მეგრელიძე, ი.ჩხარტიშვილი.</i> ბარომემბრანების ოპტიმალური პარამეტრების დადგენით მცენარეული ექსტრაქტების ფილტრაციის ინტენსივობის გაზრდა | 111 |
| <i>ხ.ნოზაძე, ლ.ებანოიძე, დ.ჯინჭარაძე, ნ.ბოკუჩავა.</i> სამკურნალო-კოსმეტიკური ჰიგიენური ლოსიონი | 115 |
| <i>მ.ხუციშვილი.</i> ლაზერული შედუღებისას ორთქლაირიანი არხის უკანა კედლის რხევების მათემატიკური ანალიზი* | 131 |
| გახსენება - რაულ ჩაგუნავა | 132 |
| გახსენება - ავთანდილ დოლიძე | 136 |
| ინფორმაცია ავტორებისათვის | 139 |

*რეზიუმე

Contents
ANALYTICAL CHEMISTRY

- B.Gogichaishvili, I.Didberidze, N.Bregadze.* Determination of Trace Element Contents in Some Mineral Waters of Georgia with the Use of Chromatographic Concentrating* 10

INORGANIC CHEMISTRY

- V.Rukhadze, I.Kamushadze, M.Kukhalashvili.* Influence of Barium Sulphate Synthesis Conditions on Its Quality Index 14

ELECTROCHEMISTRY

- T.A.Chakhunashvili, T.V.Rokva, Zh.M.Kebadze, M.T.Dadunashvili, Z.Sh.Vatsadze, Sh.M.Makhatadze, N.I.Butliashvili.* Assemblage of Pilot-Demonstration Plant for Receipt of Electrolytic Manganese Dioxide and Hydrogen and Testing of Large-Scale Electrolytic Bath* 19

- Ts.Gagnidze, Zh.Kebadze, M.Bolotashvili, L.Kakuria, K.Ugrelidze.* Investigation of the Possibility for the Use of Carbon Materials as the Cathodes at Simultaneous Electrolytical Preparation of Manganese Dioxide and Hydrogen* 25

ORGANIC CHEMISTRY

- I.Jinikashvili, M.Tsitsagi, K.Sarajishvili, K.Ebralidze, V.Tsitsishvili.* Synthesis Of Pirrolophthalazines* 29

- N.Chaganava, L.Gogua.* Relationship Between Chalkones Structures and Their Pharmacological Properties* 37

PHYSICAL CHEMISTRY

- Sh.Andguladze, A.Berejiani, M.Berezhiani, G.Mchedlishvili.* Computer Simulation of the Fluidized Bed Hydrodynamics in Granular Barites Reduction Process* 40

- G.Bezarashvili, K.Sulaberidze, D.Petviashvili, L.Gurchumelia, M.Kekenadze.* To the question of Heterogeneous Inhibition of Flame 41

- R.Djanelidze, E.Tsitsishvili.* Exciton Fine Structure in Low Symmetry Quantum Dots 47

- A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I.Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, R.G.Gulyaev, L.P.Bychkova, M.A.Dzagania, V.P.Zlomanov.* Investigation of Strained Nanolayers of A^{IV}B^{VI} Semiconductors on Dielectric Substrates 69

MATHEMATICAL CHEMISTRY

- N.O.Kupatadze, Z.I.Machaidze, M.V.Bedinashvili, M.I.Gverdsiteli.* Mathematical-Chemical Investigation of the Mobility of Pb₄P⁺ Ion in Alcohol Solutions* 72

CHEMISTRY OF COORDINATIONAL COMPOUNDS

- N.Ochkhikidze, T.Matitaishvili, K.Didebulidze, E.Elizbarashvili.* Synthesis of Cr³⁺ and Cu²⁺ Containing Complexes of Macrocyclic Azomethines and Investigation of their Antimicrobial Activity* 76

CHEMISTRY OF MACROMOLECULAR COMPOUNDS

- A.Porchkhidze.* The Polymers Creeping in the Water Solutions During the Diffusion Restriction Absence 78

OIL CHEMISTRY

- G.Khitiri, T.Gabunia, Z.Amiridze.* Some Considerations about Utilization of Pipeline Residue 80

BIOORGANIC CHEMISTRY

- N.Shengelia, L.Tabatadze, Z.Phachulia, R.Gakhokidze.* Synthesis of 2-β-D-glucopyranosyl-α-D-mannopyranose* 83

*Summary

| | |
|--|-----|
| ENVIRONMENTAL CHEMISTRY | |
| <i>N.Kuchava</i> . On Interaction of Chemical Element (Cr) with Algae <i>Spirulina platensis</i> * | 87 |
| <i>O.Rcheulishvili, L.Tughushi, E.Ginturi, E.Kirkesali, A.Rcheulishvili</i> . Studying Intake Process of Mn, Cd and Zn from Soil and their Distribution in Wheat and Barley* | 92 |
| AGRARIAN CHEMISTRY | |
| <i>L.Japaridze, Ts.Gabelia, E.Salugvadze, N.Osipova, T.Kvernadze, K.Ebralidze</i> . Investigation of Physical-Chemical Properties of the Modified Askan-Clay* | 96 |
| CHEMISTRY OF NATURAL COMPOUNDS | |
| <i>M.M.Benidze, V.G.Nebieridze, A.V.Skhirtladze, E.P.Kemertelidze, M.Ganzer</i> . Some Components of <i>Yucca gloriosa</i> L. Stems* | 99 |
| CHEMICAL TECHNOLOGY | |
| <i>M.Gvianidze, E.Shengelia, L.Gvasalia</i> . Influence of Rehabilitation of Sewerage Systems of Batumi and the Efficiency of the Wastewater Treatment Plant of Adlia* | 103 |
| <i>Sh.Andguladze, G.Mchedlishvili, A.Berejiani</i> . The Opportunity to Use of the Recycling Process at Madneuli Ore-Processing Plant* | 106 |
| <i>M.Tsitsagi, M.Ckhaidze, M.Khachidze, M.Buzariashvili, K.Ebralidze, V.Tsitsishvili</i> . Sequential Extraction of Flavonols, Triterpenoids and Pectin from Apple Peel* | 110 |
| <i>R.Gotsiridze, N.Mkheidze, S.Mkheidze, N.Megrelidze, I.Chkhartishvili</i> . Acceleration of Vegetative Extracts Filtration Rate with Determination of the Optimal Parameters of Baromembranes* | 114 |
| <i>Kh.No zadze, L.Enaboidze, D.Jincharadze, N.Bokuchava</i> . Medicinal-Cosmetic Hygienic Lotion* | 117 |
| <i>M.G. Khutsishvili</i> . Mathematical Analysis of Vibrations of Rear Wall of Steam-Gas Channel During Laser Welding* | 131 |
| CONDOLENCE – Raul CHAGUNAVA | 135 |
| CONDOLENCE – Avtandil DOLIDZE | 138 |
| INFORMATION for AUTHORS | 139 |

Содержание

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Б.Гогичаишвили, И.Дидбаридзе, Н.Брегадзе.* Определение микроэлементного состава некоторых минеральных водах Грузии с применением хроматографического концентрирования 9

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- В.В.Рухадзе, И.Д.Камушадзе, М.Г.Кухалашвили.* Влияние условий синтеза сульфата бария на показатель качества* 14

ЭЛЕКТРОХИМИЯ

- Т.А.Чахунашвили, Т.В.Роква, Ж.М.Кебадзе, М.Т.Дадунашвили, З.Ш.Вацадзе, Ш.М.Махатадзе, Н.И.Бутлиаишвили.* Сборка опытно-демонстрационного устройства для получения электролитического диоксида марганца и водорода и испытание электролитической ванны укрупненного масштаба* 19

- Ц.М.Гагнидзе, Ж.М.Кебадзе, М.М.Болотаишвили, Л.Ш.Какурия, К.Т.Угрелидзе.* Исследование возможности использования углеродистых материалов в качестве катодов в процессе одновременного электролитического получения двуокиси марганца и водорода* 20

ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- И.Дженикашвили, М.Цицаги, К.Сараджишвили, К.Эбралидзе, В.Цицишвили.* Синтез пирролофталазинов* 29

- Н.Т.Чаганова, Л.Д.Гозуа.* Зависимость фармакологических свойств халконов от их структуры* 37

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Ш.Н.Андгуладзе, А.М.Бережиани, М.Г.Бережиани, Г.Н.Мчедлишвили.* Компьютерная симуляция гидродинамики псевдооживленного слоя при восстановлении гранулированных баритов* 40

- Г.С.Безарашвили, К.Т.Сулаберидзе, Д.И.Петвиашвили, Л.В.Гурчумелиа, М.Г.Кекенадзе.* К вопросу о гетерогенном ингибировании пламени* 46

- Р.Джанелидзе, Е.Цицишвили.* Тонкая структура экситона в низкосимметричных квантовых точках* 56

- А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледиани, Л.П.Бычкова, Р.Г.Гуляев, М.А.Дзагания, В.П.Зломанов.* Исследование напряженных нанослоев полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ на диэлектрических подложках* 57

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

- Н.О.Купатадзе, З.И.Мачаидзе, М.В.Бединашвили, М.И.Гвердцители.* Математико-химическое исследование подвижности Pb_4P^+ иона в спиртовых растворах* 72

ХИМИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

- Н.Т.Очхикидзе, Т.Р.Матитаишвили, К.А.Дидебулидзе, Э.Н.Элизбарашвили.* Синтез Cr^{3+} и Cu^{2+} содержащих комплексов на основе макроциклических азометиновых соединений и изучение их противомикробных свойств* 76

ХИМИЯ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

- А.Порчхидзе.* Ползучесть полимеров в водных средах в условиях отсутствия диффузионных ограничений* 78

*Резюме

НЕФТЕХИМИЯ

Г.Ш.Хитири, Т.И.Габуня, З.С.Амиридзе. Некоторые соображения по применению остатков нефтепровода* 80

БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Н.Г.Шенгелия, Л.В.Табатадзе, З.В.Пачулия, Р.А.Гахокидзе. Синтез 2-β-D-глюкопиранозил-α-D-маннопиранозы* 83

ХИМИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Н.Кучава. О взаимодействии химического элемента хрома (Cr) с водорослью *Spirulina platensis** 87

О.А.Рчеулишвили, Л.С.Тугуши, Е.Н.Гинтури, Е.И.Киркесали, А.Н.Рчеулишвили. Исследование усвоения элементов Cu, Mn, Cd и Zn из почвы и их распределение в пшенице и овсе* 92

АГРОХИМИЯ

Л.К.Джапаридзе, Ц.С.Габелиа, Э.Ш.Салуквадзе, Н.А.Осипова, Т.К.Квернадзе, К.Г.Эбралидзе. Исследование физико-химических свойств модифицированной аскан-глины* 96

ХИМИЯ ПРИРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

М.М.Бенидзе, В.Г.Небиеридзе, А.В.Схиртладзе, Э.П.Кемертелидзе, М.Ганцера. Некоторые компоненты стеблей *Yucca gloriosa* L. 97

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

М.Д.Гвианидзе, Е.Г.Шенгелия, Л.И.Гвасалия. Влияние реабилитации канализационной системы г. Батуми на эффективность работы Адлийской очистной станции сточных вод* 103

Ш.Н.Андгуладзе, Г.С.Мchedlishvili, А.М.Бережиани. Возможность использования процесса рециклирования в Маднеулском горно-обогатительном комбинате* 106

М.Цицаги, М.Чхаидзе, М.Хачидзе, М.Бузариашвили, К.Эбралидзе, В.Цицишвили. Ступенчатая экстракция флавонолов, тритерпеноидов и пектина из кожуры яблок* 110

Р.С.Гоциридзе, Н.П.Мхеидзе, Н.А.Мегрелидзе, С.Н.Мхеидзе, И.Н.Чхартушвили. Улучшение интенсивности фильтрации растительных экстрактов путем установления оптимальных параметров баромембран* 114

Х.Нозадзе, Л.Эбаноидзе, Д.Джинчарадзе, Н.Бокучава. Лечебно-косметический гигиенический лосьон* 117

М.Г.Хуцишвили. Математический анализ колебаний задней стенки парогазового канала при лазерной сварке 118

ПАМЯТИ Р.В.ЧАГУНАВА 135

ПАМЯТИ А.В.ДОЛИДЗЕ 138

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ 139

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРОЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА НЕКОТОРЫХ МИНЕРАЛЬНЫХ ВОДАХ ГРУЗИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ

Б. Гогичаишвили, И. Дидбаридзе, Н. Брегадзе
Государственный университет Ак. Церетели

Несмотря на большую историю изучения минеральных вод Грузии, содержание некоторых микроэлементов в них исследована недостаточно. Основная часть исследованных проб предоставляет минеральных воды западной Грузии, применяемые в основном для бальнеопроцедур. При разработке методики определения Zn, Cu, Co, Ni, Cr, Mn в минеральных водах нами в качестве винилпи сорбентов были использованы винилпиридиновый амфолит АНКБ-2 и иминодиацетатный амфолит АНКБ-10.

Для определения оптимальных условий концентрирования наряду с изучением влияния сорбента исследовалось также и влияние кислотности растворов и объемов проб, пропускаемых через адсорбент [1]. Был найден оптимальных элемент для десорбции и установлены режимы сорбции и десорбции.

Таблица 1. Влияние химической природы десорбирующего реагента на полную десорбции микроэлементов

| Десорбир. Реагент | Пропущ.объем мл. | Концентрация микроэлемента в мг/л | | | |
|----------------------|------------------|-----------------------------------|-----|-----|-----|
| | | Cu | Ni | Co | Zn |
| 2N HCl | 17 | 0,1 | 5,0 | 0,2 | 2,0 |
| | 4 | 0,4 | 0,6 | 0,4 | 2,5 |
| 2N HClO ₄ | 7 | 1,5 | 0,8 | - | 2,0 |
| | 5 | 1,0 | - | - | 3,0 |
| | 18 | 0,2 | - | - | 0,1 |
| | 14 | 0,1 | - | - | - |

Разработка методика концентрирования заключается в следующем. В хроматографическую колонку помещается 0,2 г. Адсорбента АНКБ-2 в Н-форме. В исследуемую воду, взятую в количестве 1-2 литра для средней минерализации и 3 л. Для вод с низкой минерализацией (меньше 1,0 г/л) добавляется соляная кислота до pH 2-3. Вода пропускается через колонку со скоростью 0,7-1,0 мл/мин. Микроэлементы элюируются 15-20 мл 2 N хлорной кислоты со скоростью 0,5 мл/мин. Полученный элюат выпаривается. Сухой остаток в дистиллированной воде, переносится в мерную колбу на 25 мл и доводится водой до метки.

Описанная методика позволяет сконцентрировать микроэлементы в 40-120 раз. Сконцентрированные элементы (Zn, Cu, Co, Ni, Cr, Mn) определять методом атомно-абсорбционной фотометрии. Полученные результаты приведены в таблице №2.

По величине минерализации среди исследованных вод имеются как воды с малой минерализацией – до 1 г/л, так и средней минерализацией – до 5 г/л. Величина pH лежит в пределах 6,2-10,1 причем для большинства исследованных вод близка к нейтральному значению. Среди катионов ведущими являются кальций и натрий, в значительном количестве встречается магний. Среди анионов чаще всего преобладает сульфат -ион, затем хлорид – ион.

Из полученных результатов видно, что микроэлементы, для которых было проведено хроматографическое концентрирование, содержатся в исследованных водах в очень малых концентрациях. Кобальт вообще не был обнаружен ни в одной воде. Лишь в некоторых пробах обнаружен марганец. В сравнительно больших количествах определен цинк. Его концентрация для неуглекислых вод лежит в пределах $1,3 \cdot 10^{-5}$ – $8,1 \cdot 10^{-5}$ г/л.

Пределы, в которых лежат найденные концентрации меди ($1,5 \cdot 10^{-6}$ – $4,0 \cdot 10^{-6}$ г/л) гораздо уже, нежели у цинка. Концентрация лежит в пределах $9,1 \cdot 10^{-6}$ – $1,3 \cdot 10^{-5}$ г/л. Содержание хрома в исследованных водах незначительно и лежит в пределах $4,7 \cdot 10^{-7}$ – $6,4 \cdot 10^{-6}$ г/л.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют об эффективности применения хроматографического концентрирования для определения в водах ряда микроэлементов. В свою очередь фактические данные по содержанию микроэлементов подтверждают целесообразность более широкого изучения этого вопроса в гидроиологическом, гидрохимическом и бальнеологическом аспектах.

Таблица 2. Среднее содержание микроэлементов в минеральных водах

| Наименование минеральной воды и ее химической состав | Концентрации микроэлементов в г/л | | | | | |
|--|-----------------------------------|-----------------------|----------------------|---------|----------------------|----------------------|
| | Zn | Cu | Ni | Co | Cr | Mn |
| Цхалтубო ისტ.6 t 34 ⁰ pH 7,1 M _{0,75} $\frac{SO^4 43 HCO^3 31 Cl 26}{Ca 61 Na 20 Mg 15}$ | 1,7·10 ⁻⁵ | 3,36·10 ⁻⁶ | 9,1·10 ⁻⁶ | He обн. | 4,7·10 ⁻⁷ | 4,3·10 ⁻⁶ |
| Самтредია t 61 ⁰ pH 7,5 M _{2,8} $\frac{Cl 64 SO^4 28}{Ca 50 (Na+K) 38}$ | 2,6·10 ⁻⁵ | 1,5·10 ⁻⁶ | 4,4·10 ⁻⁶ | He обн. | 6,4·10 ⁻⁶ | 4,4·10 ⁻⁶ |
| Сулори t 34 ⁰ H ₂ S 0,003 pH 10,1 M _{0,44} $\frac{(CO^3 + HCO^3) 57 SO^4 27}{Na 70 Ca 15}$ | 1,3·10 ⁻⁵ | 1,1·10 ⁻⁶ | 2,8·10 ⁻⁶ | He обн. | 4,7·10 ⁻⁶ | He обн. |
| Амаგლეба M _{10,3} $\frac{Cl HCO^3 17}{Na 67 Ca 18}$ | 8,1·10 ⁻⁵ | 4,0·10 ⁻⁶ | 1,3·10 ⁻⁵ | Следы | He обн. | He обн. |
| Курсები t 13 ⁰ H ₂ S 0,005 pH 7,7 M _{0,44} $\frac{HCO^3 77 SO^4 14}{Na 42 Ca 30 Mg 30}$ | 1,8·10 ⁻⁵ | 2,4·10 ⁻⁶ | 5,5·10 ⁻⁶ | Следы | 1,9·10 ⁻⁶ | 8,5·10 ⁻⁶ |

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. К. М. Олшанова, М. А. Потапова Практикум по хроматографическому анализу. М. 1970.
2. Н.Н. Маторина, Г.Г. Джиннчарадзе, Б.А. Гогичаишвили. О некоторых условиях сорбции микроэлементов на амфолитах при их определении в минеральных водах. Известия Академии наук Грузии. 1978.
3. ბ. გოგიჩაიშვილი, ი. დიდბარიძე. ზოგიერთი მიკროელემენტის ქრომატოგრაფიული კონცენტრაციების ოპტიმალური პირობების შერჩევა ბუნებრივ წყლებში მათი განსაზღვრის მიზნით. საქართველოს ქიმიური ჟურნალი. ტ. 15. №1. 2015.

მიკროელემენტების განსაზღვრა საქართველოს მინერალურ წყლებში ქრომატოგრაფიული კონცენტრაციების მეთოდით

ბ. გოგიჩაიშვილი, ი. დიდბარიძე, ნ. ბრეგაძე
აკაკიწერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
რეზიუმე

ქიმიურ ელემენტებს შორის, რომლებიც გვხვდება მინერალურ წყლებში მცირე რაოდენობით, ყურადღებას იმსახურებს გარკვეული ბიოლოგიური აქტივობის ელემენტები Zn, Cu, Co, Ni, Cr, Mn. მათი განსაზღვრისათვის შემუშავებულია ამფოლიტ ANKB-2 წინასწარი იონგაცვლითი ქრომატოგრაფიული მეთოდი, რომელიც შესაძლებლობას იძლევა მიკროელემენტების კონცენტრირებას 40-120 ჯერ და მათ დაცილებას მაკროკომპონენტებისაგან. დასავლეთ საქართველოს ზოგიერთი მინერალური წყლების სინჯებში განისაზღვრება ზემოთ ჩამოთვლილი მიკროელემენტები. სტატიაში მოყვანილი ზოგიერთი ცნობები წყალში ელემენტების შემცველობის შესახებ მიღებულია პირველად.

DETERMINATION OF TRACE ELEMENT CONTENTS IN SOME MINERAL WATERS OF GEORGIA WITH THE USE OF CHROMATOGRAPHIC CONCENTRATING

B.Gogichaishvili, I.Didberidze, N.Bregadze
Akaki Tsereteli State University

SUMMARY

Among chemical elements found in mineral waters in small amounts, trace elements Zn, Cu, Co, Ni, Cr, Mn having certain biological activating are of interest. To determine their contents in waters meters method of preliminary chromatographic concentrating an ampholyte ANKB-2 was worked out. This method permits to increase trace element concentration for 40-120 times and to separate them at the same time from macrocomponents.

ბარიუმის სულფატის სინთეზის პირობების გავლენა მის ხარისხობრივ მაჩვენებლებზე

ვ. რუხაძე, ი. ქამუშაძე, მ. კუხალაშვილი
აკაკი წერეთლის სახელწიფო უნივერსიტეტი

ნაშრომში მოყვანილია განსაზღვრული თვისებების მქონე ბარიუმის სულფატის სინთეზისთვის შესრულებული ექსპერიმენტული კვლევის შედეგები. აღსანიშნავია, რომ ბლანფიქსი, რომელიც გამოიყენება პიგმენტების შემავსებლად, ნაკლებადაა შესწავლილი [1,2]. ბარიუმის სულფიდისა და ამონიუმის სულფატის ხსნარების ურთიერთმოქმედება ხორციელდება 50-60°C ტემპერატურაზე. პროცესის იზოთერმულობის დაცვის მიზნით სარეაქციო ქიმიური ჭიქა მოთავსებული იყო თერმოსტატში. პროცესის ტემპერატურა რეგულირდებოდა და კონტროლი ხორციელდებოდა სარეაქციო არეში მოთავსებული საკონტაქტო თერმომეტრით. პროცესი რეალიზდებოდა სარეაქციო არის ინტენსიური მორევით (200-300 ბრ/წთ), რომელშიც მოთავსებული იყო pH ელექტროდები, რაც საშუალებას გვაძლევდა უწყვეტად გავვსაზღვრა სინთეზის pH.

პროცესის დამთავრების შემდეგ პულპა ყოვნდება 24 საათი. პულპის გაფილტვრით, მიღებულ ნაერთს (BaSO₄) ვაშრობდით 100-110°C. მიღებული ბარიუმის სულფატის ზეთშემცველობა და დაფარვის უნარი ისაზღვრება ცნობილი ГОСТ8784-5 სტანდარტის მიხედვით. ნაწილაკების ზომას ვსაზღვრავდით ელექტრო მიკროსკოპზე.

ცხრილი 1

მორეაგირე რეაგენტების შერევის თანმიმდევრობის გავლენა ბლანფიქსის ძირითად ფიზიკურ თვისებებზე

| | შერევის თანმიმდევრობა | | |
|-------------------------------------|--|---|--|
| | BaS → (NH ₄) ₂ SO ₄ (I) | (NH ₄) ₂ SO ₄ → BaS (II) | BaS ↔ (NH ₄) ₂ SO ₄ (III) |
| ზეთტევადობა, გ/100გ | 10 | 13 | 11 |
| დაფარვის უნარი გ/მ ² | 350 | 480 | 390 |
| სინთეზის საწყისი pH | 6,6 | 12,5 | 7-7,5 |
| სინთეზის საბოლოო pH | 7.5 | 6.6 | 7-7.5 |
| აგლომერატების საშუალო დიამეტრი, მკმ | 0,32 | 0,12 | 0,28 |

რეალიზებული ექსპერიმენტის შედეგებიდან (ცხრილი 1) ჩანს, რომ მორეაგირე ნივთიერებათა შერევის თანმიმდევრობა გავლენას ახდენს სინთეზის pH-ზე, ხოლო ეს უკანასკნელი ნაწილაკების საბოლოო ზომაზე, რაც საბოლოოდ აისახება ბლანფიქსის ფიზიკურ თვისებებში.

დადგენილია სინთეზის pH - ის გავლენა ბლანფიქსის გრანულომეტრულ შემადგენლობაზე (ცხრილი 2). მიღებული შედეგებიდან ჩანს, რომ მყავე არეში მიღებული აგლომერატების საშუალო ზომა უფრო მეტია, ვიდრე ტუტე არეში. ხოლო როცა სინთეზი ტარდება მუდმივ pH-ზე, მაშინ მიღებული ბლანფიქსის ნაწილაკები ახლოსაა მონოდისპერსულთან.

ნაწილაკების ოპტიმალურ ზომად უნდა მივიჩნიოთ 0,75 - 0,77 მკმ, რომელიც მიიღება pH – 1-4 ინტერვალში. ამ პირობებში მიღებული ბლანფიქსის დაფარვის უნარია 200-250 გ/მ², ხოლო ზეთშემცველობა 7 – 7,5 გ/100 გ. სინთეზის პროცესში მყავე არის შენარჩუნების მიზნით, მიზანშეწონილია ამონიუმის სულფატი სტექქომეტრულთან შედარებით ავილოთ ჭარბი რაოდენობით, ხოლო ხსნარების შერევა I ან III თანმიმდევრობით.

ცხრილი 2

სინთეზირებული ბლანფიქსის გრანულომეტრული შემადგენლობის დამოკიდებულება სარეაქციო არის pH - ის სიდიდეზე

| pH | ნიმუშების გრანულომეტრული შემადგენლობა | | | ნაწილაკების საშუალო დიამეტრი, მკმ | სტანდარტული გადახრა |
|-----|---------------------------------------|-----------------------|-------|-----------------------------------|---------------------|
| | ნაწილაკების დიამეტრი, მკმ | ნაწილაკების რაოდენობა | % | | |
| 12 | 0,04 | 53 | 46 | 0,11 | 0,076 |
| | 0,13 | 42 | 37 | | |
| | 0,22 | 16 | 14 | | |
| | 0,31 | 3 | 3 | | |
| | 0,4 | 1 | 1 | | |
| | 0,49 | 0 | 0 | | |
| 10 | 0,04 | 28 | 20 | 0,13 | 0,053 |
| | 0,13 | 90 | 65 | | |
| | 0,22 | 20 | 14 | | |
| | 0,31 | 0 | 0 | | |
| 8 | 0.09 | 1 | 1 | 0.24 | 0.071 |
| | 0.21 | 91 | 81 | | |
| | 0.45 | 20 | 18 | | |
| | 0.62 | 0 | 0 | | |
| 6 | 0.09 | 23 | 23 | 0.37 | 0.23 |
| | 0.27 | 30 | 30 | | |
| | 0.45 | 24 | 24 | | |
| | 0.62 | 14 | 13 | | |
| | 0.8 | 8 | 8 | | |
| | 0.98 | 0 | 0 | | |
| | 1.1 | 1 | 1 | | |
| | 1.34 | 0 | 0 | | |
| 3-4 | 0.18 | 10 | 7.1 | 0.75 | 0.2 |
| | 0.73 | 40 | 28.6 | | |
| | 0.82 | 90 | 64.31 | | |
| | 1.25 | 0 | | | |
| 1-2 | 0.18 | 9 | 6.05 | 0.77 | 0.24 |
| | 0.69 | 65 | 43.62 | | |
| | 0.88 | 70 | 46.98 | | |
| | 1.24 | 4 | 2.68 | | |
| | 1.59 | 1 | 0.7 | | |

შემოთავაზებული პროცესის ოპტიმალური პირობების შესარჩევად კვლევის პირველ ეტაპზე რეალიზებულია 2⁴ტიპის სრული ფაქტორული ექსპერიმენტი (ცხრილი 3), სადაც Y_{თეორ.} და Y_{ექსპ.} ბლანფიქსის გამოსავალია.

პროცესი აღწარმოებადია (კოხნერის კოეფიციენტი $G_{ცხრ} = 0,96 < G_{გამ} = 0,52$) და საშუალო კვადრატული გადახრა 0,41% შეადგენს. გამოთვლილია რეგრესიის განტოლება:

$$Y = 57,95 + 0,05 X_1 + 1.3X_2 + 3.83 X_3 + 2.01 X_4$$

მიღებული მათემატიკური დამოკიდებულებების ანალიზი მიგვანიშნებს, რომ ბარიუმის სულფატის გამოსავალზე ყველა ცვლადი ფაქტორი ახდენს დადებით გავლენას. აღნიშნული პროცესის ოპტიმიზაციისათვის რეალიზებულია უსწრაფესი ასვლის გეგმა (ცხრილი 4).

ცხრილი 3

2⁴ ტიპის სრული ექსპერიმენტის რეალიზაციის გეგმა და სათანადო ამოძახილები

| ფაქტორების ნატურალური სიდიდეები | | (NH ₄) ₂ SO ₄ გ/ლ ξ ₁ | BaS, გ/ლ ξ ₂ | ფარდობა (NH ₄) ₂ SO ₄ /BaS ξ ₃ | პროცესის ხანგრძლივობა, ξ _{4წთ.} | ბარიუმის სულფატის გამოსავალი | | |
|---|--|--|-------------------------------|---|--|------------------------------------|------------------|-------|
| | | | | | | Y თეორ., % | Y ექსპ., % | |
| ძირითადი დონე ვარიების ინტერვალი ზედა დონე ქვედა დონე | | 50 | 70 | 1,1 | 10 | | | |
| | | 5 | 10 | 0,05 | 5 | | | |
| | | 55 | 80 | 1,15 | 15 | | | |
| | | 45 | 60 | 1,05 | 5 | | | |
| ცვლადების კოდ. აღნიშვნა | X ₀ | X ₁ | X ₂ | X ₃ | X ₄ | | | |
| ეტაპი N | | | | | | | | |
| 1 | რეა ლიზა ციის თანმი მდევ რობა | + | + | + | + | + | 69,4 | 65,54 |
| 2 | | + | - | + | + | - | 68,5 | 65,44 |
| 3 | | + | + | - | + | + | 62,5 | 62,94 |
| 4 | | + | - | - | + | + | 51,4 | 62,84 |
| 5 | | + | + | + | - | + | 60,2 | 57,88 |
| 6 | | + | - | + | - | + | 56,6 | 57,78 |
| 7 | | + | + | - | - | + | 59,6 | 55,28 |
| 8 | | + | - | - | - | + | 54,3 | 55,18 |
| 9 | | + | + | + | + | - | 65,1 | 60,72 |
| 10 | | + | - | + | + | - | 66,7 | 60,62 |
| 11 | | + | + | - | + | - | 53,5 | 58,12 |
| 12 | | + | - | - | + | - | 56,7 | 58,02 |
| 13 | | + | + | + | - | - | 34,5 | 53,06 |
| 14 | | + | - | + | - | - | 53,0 | 52,96 |
| 15 | | + | + | - | - | - | 58,8 | 50,46 |
| 16 | | + | - | - | - | - | 56,0 | 50,36 |

ცხრილი 4

ბარიუმის სულფატის სინთეზის უსწრაფესი ასვლის გეგმა

| ფაქტორები | (NH ₄) ₂ SO ₄ გ/ლ ξ ₁ | BaS, გ/ლ ξ ₂ | ფარდობა (NH ₄) ₂ SO ₄ /BaS ξ ₃ | პროცესის ხანგრძლივობა ξ _{4წთ.} | ბარიუმის სულფატის გამოსავალი | |
|---------------------------------------|--|-------------------------------|---|---|---------------------------------|---------------|
| | | | | | Y თეორ., % | Y ექსპ., % |
| ახალი ძირითადი დონეები | 100 | 70 | 1,1 | 20 | | |
| რეგრესიის კოეფიციენტები | 0,05 | 1,3 | 3,83 | 2,41 | | |
| Bi | 0.25 | 13 | 0.19 | 12.05 | | |
| $\Delta = \frac{p^*}{bi * pi}$ | | | | 0.8 | | |
| ვარიების ინტერვალი P* = pi*bi*Δ | 0.2 | 10.4 | 0.15 | 9.64 | | |
| ბიჯები | | | | | | |
| 1. | 100,2 | 80,4 | 1,25 | 29,64 | 80,76 | 79,51 |
| 2. | 100,4 | 90,8 | 1,4 | 39,28 | 98,24 | 98,52 |
| 3. | 100,6 | 101,2 | 1,55 | 48,92 | 115,75 | 99,30 |

მიღებული შედეგები მიგვანიშნებს, რომ რეალიზებული პროცესის მეორე პირობებში ε_1 - 100 გ/ლ; ε_2 - 90,8 გ/ლ; ε_3 - 1,4 და ε_4 - 40 წთ. ბარიუმის სულფატის გამოსავალი მაღალია და შეადგენს 98,5%-ს..

ლიტერატურა -REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Беленький Е. Ф., Риским М. В. Химия и технология пигментов. Л.: Химия, 1984.
2. Седлочек Л. М. Влияние условий осаждения на качество бланфика. Черкассы, 1990.

INFLUENCE OF BARIUM SULPHATE SYNTHESIS CONDITIONS ON ITS QUALITY INDEX

V.Rukhadze, I.Kamushadze, M.Kukhalashvili
AkakiTsereteli Kutaisi State University

SUMMARY

The results of experimental investigation in the work to obtain barium sulphate by interaction of barium and ammonia sulfate solution are presented. It is shown that pH of the synthesis strongly affects the size of barium sulfate particles. It is shown that in the choosen optimal conditions of the process ($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ – 100.4 gr/l, BaS – 90,8 gr/l, the intensive pulp mixing time is 40 min), the yield of BaSO_4 to obtain high percent lithopone is 98,5%.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА СУЛЬФАТА БАРИЯ НА ПОКАЗАТЕЛЬ КАЧЕСТВА

В.В.Рухадзе, И.Д.Камушадзе, М.Г.Кухалашвили
Государственный университет им. А. Церетели

РЕЗЮМЕ

Приводятся результаты экспериментального исследования процесса получения сульфата бария взаимодействием растворов сульфида бария и сульфата аммония. Показано, что на величину частиц сульфата бария существенно влияет pH синтеза. Показано, что в подобранных оптимальных условиях процесса ($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ – 100.4 г/л, BaS – 90,8 г/л, время интенсивного перемешивания пульпы – 40 мин.) выход целевого продукта (BaSO_4), пригодного для получения высокопроцентного литопона, составляет 98,5%.

**ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდისა და წყალბადის
მისაღები საცდელ-სადემონსტრაციო დანადგარის აწყობა და
ბამსხვილებული მასშტაბის ელექტროლიზური აბაზანის ბამოცდა**

თემურ ჩახუნაშვილი, თეიმურაზ როყვა, ჟიული ქებაძე, მერაბ დადუნაშვილი, ზინაიდა ვაწაძე, შოთა მახათაძე, ნანული ბუთლიაშვილი
*ი. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
რ. აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი*

გამოდინარე ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდის (ემდ) არსებული წარმოებების ხარვეზებიდან: ცუდი სანიტარულ-ჰიგიენური პირობები, არასაკმარისი უსაფრთხოება, მნიშვნელოვანი მატერიალური და თბური დანაკარგები, ნაჩვენებია ემდ-ის მისაღები აბაზანის კონსტრუქციული ვაუჭობების მიზანშეწონილობა და აუცილებლობა. აღწერილია ემდ-ისა და წყალბადის მისაღები საცდელ-სადემონსტრაციო დანადგარზე დამონტაჟებული მოწყობილობა. მოცემულია ჩატარებული ელექტროლიზის გამსხვილებული მასშტაბის ცდების ძირითადი შედეგები.

ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდი (ემდ) წარმოადგენს ერთ-ერთ უმნიშვნელოვანეს მანგანუმემცველ ქიმიურ პროდუქტს [1]. სამრეწველო პირობებში ის მიიღება ღია ელექტროლიზურ აბაზანებში მანგანუმის გოგირდმჟავით შემჟავებული ხსნარებიდან. პროცესი ტარდება მუშა ხსნარის დუდილის ტემპერატურასთან მიახლოებულ ტემპერატურაზე (93–96°C), რაც დაკავშირებულია ღია აბაზანებიდან ხსნარის ინტენსიურ აორთქლებასთან და ღიდ მატერიალურ და თბურ დანაკარგებთან.

ემდ-ის მისაღები ღია ელექტროლიზური აბაზანა ჩვეულებრივად წარმოადგენს პარალელეპიპედის ფორმის ნახშირბადოვანი ფოლადისაგან დამზადებულ აპარატს, რომელიც ქიმიური დაცვის მიზნით ამოგებულია მჟავაგამძლე ფილებით, რეზინით ან რომელიმე პოლიმერული მასალით, რომელიც მდგრადია 90-95°C ტემპერატურის მქონე მანგანუმის სულფატის შემჟავებულ ხსნარებში. ღია ელექტროლიზურ აბაზანაში ერთმანეთის პარალელურად მონაცვლეობით ჩაწყობილია ანოდები (ტიტანი, გრაფიტი, ტყვიის შენადნობი სტიბიუმთან) და კათოდები (გრაფიტი, ტყვია, მალალეგირებული უჟანგავი ფოლადი, სპილენძი). მუდმივი დენით დატვირთვის დროს ანოდებზე გამოიყოფა მანგანუმის დიოქსიდის კომპაქტური ნალექი. ელექტროლიზის რეჟიმზე დამოკიდებულებით (ტემპერატურა, მანგანუმის სულფატის კონცენტრაცია, გოგირდმჟავის შემცველობა, ანოდური დენის სიმკვრივე, ანოდის მასალა, ზოგიერთი მძიმე ლითონის შემცველობა ხსნარში) ანოდებზე მანგანუმის დიოქსიდთან ერთად შესაძლებელია მცირე რაოდენობით აირადი ჟანგბადის გამოყოფა. რაც შეეხება კათოდებს, მათზე ჯამური ელექტროქიმიური რეაქციის თანახმად რაოდენობრივად გამოიყოფა აირადი წყალბადი.

ღია აბაზანებში კათოდებზე გამოყოფილი წყალბადი ერევა ჰაერს და წარმოიქმნება ჰაერ-წყალბადის ნარევი, რომელიც წყალბადისა და ჟანგბადის კონცენტრაციის ფართო ზღვარში ფეთქებადსაშიშაა.

მდგომარეობას ართულებს ის გარემოებაც, რომ ხშირად აბაზანის განტვირთვა (ანოდების აბაზანიდან ამოღება) ხდება აბაზანის შუნტირების გარეშე, რასაც თან სდევს ელექტრული ნაპერწკლის წარმოქმნა ანოდის მიახლოებისას და დაშორებისას ანოდურ შინასთან. ეს კი ხშირად იწვევს წყალბადის ლოკალურ ფეთქებადი ხასიათის აალებას. მიუხედავად ამისა, ჩვენს ხელთ არსებული ინფორმაციით, ემდ-ის წარმოება სამრეწველო მასშტაბით ხორციელდება ღია აბაზანებში, რაც წინააღმდეგობას ქმნის ემდ-ის მიღების არსებულ ფაქტიურ მდგომარეობასა და წარმოების უსაფრთხოების არსებულ ნორმებსა და წესებს შორის.

აღნიშნულიდან გამომდინარე, შეიძლება ითქვას, რომ ემდ-ის არსებულ წარმოებაში (პირველ რიგში იგულისხმება ელექტროლიზის დარბაზი) საკმაოდ ფეთქებადსაშიშია და არ აკმაყოფილებს არსებულ სტანდარტებსა და ნორმებს წარმოების უსაფრთხოების თვალსაზრისით; არანაკლებ მნიშვნელოვანია ის ფაქტი, რომ ღია აბაზანის ზედაპირიდან აორთქლებული და ელექტროლიზის დარბაზში გავრცელებული მავნე ნივთიერებები (გოგირდმჟავა, მანგანუმის სულფატი, პარაფინი და სხვ.) მკვეთრად აუარესებს მომსახურე პერსონალის მუშაობის სანიტარულ-ჰიგიენურ პირობებს.

ყოველივე ზემოაღნიშნულიდან გამომდინარე, არა თუ მიზანშეწონილია, არამედ აუცილებელიცაა ემდ-ის მისაღები აბაზანის კონსტრუქციული გაუმჯობესება, რაც საშუალებას მოგვცემს აღმოიფხვრას აღნიშნული სერიოზული ხარვეზები.

პრობლემის გადაწყვეტის ერთ-ერთი ყველაზე რეალური გზა არის ახალი კონსტრუქციის დახურული ელექტროლიზური აბაზანის დამუშავება.

ემდ-ის მისაღები აბაზანები კონსტრუქციულად გარემოსთან მათი კონტაქტის თვალსაზრისით შეიძლება იყოს რამდენიმე სახის, რომელთა მოკლე დახასიათება მოცემულია ცხრილში 1.

ცხრილი 1. ემდ-ის მისაღები აბაზანების ვარიანტები ელექტროლიზის დროს გამოყოფილი აირორთქლნარევის ევაკუაციის ხასიათის მიხედვით

| რიგ. № | აბაზანის სახეობა | დადებითი მხარეები | უარყოფითი მხარეები |
|--------|--|--|--|
| 1 | ღია აბაზანა | ტექნოლოგიური პროცესის გამართულად ჩატარება დაგროვილი გამოცდილების საფუძველზე. კონსტრუქციული სიმარტივე სახურავით აღჭურვილ აბაზანებთან შედარებით. | დიდი მატერიალური და თბური დანაკარგები, ცუდი სანიტარულ-ჰიგიენური პირობები, აპარატურის კოროზია ელექტროლიზის დარბაზში, კათოდზე გამოყოფილი წყალბადის გამოუყენებლობა, ფეთქებად საფრთხიანობა |
| 2 | დახურული აბაზანა გამოყოფილი აირორთქლნარევის ევაკუაციით გარედან შეწოვილი ჰაერის დახმარებით | სანიტარულ-ჰიგიენური პირობების გაუმჯობესება ელექტროლიზის დარბაზში, ფეთქებად საფრთხიანობის შემცირება. | წყალბადის გამოუყენებლობა, მატერიალური და თბური დანაკარგების შემცირების სირთულე |
| 3 | დახურული არაჰერმეტიკული აბაზანა აირორთქლნარევის ევაკუაციით მის მიერ შექმნილი ჭარბი წნევის ხარჯზე | სანიტარულ-ჰიგიენური პირობების გაუმჯობესება, აბაზანის კონსტრუქციის გამარტივება | გამოყოფილი წყალბადის ნაწილობრივი უტილიზაცია, დამატებითი გამწოვი ვენტილაციის საჭიროება |
| 4 | დახურული ჰერმეტიკული აბაზანა | მატერიალური და თბური დანაკარგების მინიმუმამდე დაყვანა, სანიტარულ-ჰიგიენური პირობების მკვეთრი გაუმჯობესება, გამოყოფილი წყალბადის სრული უტილიზაცია | საჭიროებს დამატებით ღონისძიებებს სრული ჰერმეტიზაციის მისაღწევად. |

დახურული ელექტროლიზური აბაზანების ეფექტურობა ჩვენს მიერ შეფასებული იყო ლაბორატორიულ და მსხვილლაბორატორიულ პირობებში, შესაბამისად, 14 და 70 ლიტრი მოცულობის აბაზანების დამუშავების, დამზადებისა და გამოცდის შედეგად [2,3].

საჭიროა აღინიშნოს, რომ ჩვენს მიერ დამუშავებულ დახურული კონსტრუქციის აბაზანებს შეუძლია იმუშაოს ოთხივე ზემოთ მოყვანილი აბაზანის სამუშაო რეჟიმში.

ჩვენს მიერ ადრე ჩატარებული კვლევები, აგრეთვე ლიტერატურული მონაცემები ცალსახად მიუთითებენ იმაზე, რომ ემდ-ის მიღებისას ხსნარის ტემპერატურის მაქსიმალურად გაზრდას მთელი რიგი უპირატესობები გააჩნია (პროდუქტის ხარისხის ამაღლება, ტიტანის პასივაციამდეგობისა და დენის გამოსავლის გაზრდა), მაგრამ საელექტროლიზე ხსნარის ტემპერატურის მიახლოებისას მისი დუღილის ტემპერატურასთან მკვეთრად იზრდება აორთქლების ინტენსივობა და შესაბამისად, – ხსნარისა და თბური ენერჯის დანაკარგები ღია აბაზანის შემთხვევაში, რაც ჩვენს მიერ საგრანტო პროექტის მესამე პერიოდში ჩატარებულმა ცდებმა გვიჩვენა. ეს ფაქტი კიდევ ერთხელ მიუთითებს ემდ-ის მისაღები დახურული ელექტროლიზერის უპირატესობაზე ღია აბაზანასთან შედარებით.

სამრეწველო მასშტაბის აბაზანის დამუშავებისა და დაპროექტებისათვის აუცილებელ ეტაპს წარმოადგენს ემდ-ისა და წყალბადის მისაღები საცხელ-სადემონსტრაციო დანადგარის შექმნა, რომლის ძირითადი კვანძებია მანგანუმის სულფატის ხსნარის მიღებისა და ელექტროლიზის კვანძები.

ემდ-ისა და წყალბადის მისაღები საცხელ-სადემონსტრაციო დანადგარი აიწყო ი. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფოს უნივერსიტეტის რ. აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტის საცდელ დანადგართა კორპუსში.

მანგანუმის სულფატის ხსნარის მიღების კვანძი შედგება გამოტუტვის რეაქტორისაგან, დეკანტატორისაგან, მიღებული სუსპენზიის შესქელებული მასისა და თხევად ფაზებად გამოყოფი ნუტრ-ფილტრისაგან, ვაკუუმ-ტუმბოსაგან, მანგანუმის სულფატის ნეიტრალური ხსნარის შემკრებისა და ფაიფურის ცენტრიდანული ტუმბოსაგან.

მოკლედ დავახასიათოთ მანგანუმის სულფატის ხსნარის მიღების კვანძის ძირითადი მოწყობილობა.

მანგანუმშემცველი ნედლეულის გახსნისა და გამოტუტვის რეაქტორი წარმოადგენს ორთქლის პერანგის მქონე უჟანგავი ფოლადისაგან დამზადებულ ცილინდრული ფორმის აპარატს 1000 ლიტრი მოცულობით. იგი აღჭურვილია მოტორ-რედუქტორით (ძრავის სიმძლავრე 2,5 კვტ), ჩარჩოს ტიპის სარეველათი (ბრუნთა რიცხვი 35 ბრ/წთ), ხსნარის გამაცხელებელი აგენტის (ორთქლი, წყალი) პერანგში ცირკულაციის სისტემით, ხსნარის ტემპერატურის ავტომატური კონტროლისა და რეგულირების სქემით. უჟანგავი ფოლადისაგან დამზადებულ დეკანტატორს აქვს მართკუთხა პარალელეპიპედის ფორმა (სიგრძე 2 მ, სიგანე 1 მ, სიმაღლე 1 მ), აღჭურვილია სუსპენზიისა და ხსნარის მიღებისა და გამოყვანის მილგაყვანილობით. სუსპენზიის შესქელებული მასის გასაფილტრად გამოყენებულია უჟანგავი ფოლადისაგან დამზადებული ნუტრ-ფილტრი (ფილტრაციის ფართი 0,4 კვ.მ.). ნეიტრალური ხსნარის მიღები პოლიეთილენისაგან დამზადებული საცავის მოცულობაა 2000 ლ. ხსნარის ტრენსპორტირებისათვის გამოიყენება გერმანული წარმოების ფაიფურის ცენტრიდანული ტუმბო წარმადობით 12 კუბ.მ./საათში.

ელექტროლიზის კვანძი შედგება შემდეგი მოწყობილობებისაგან: გამსხვილებული მასშტაბის საცხელ-სადემონსტრაციო აბაზანა, ელექტრული გამმართველი, ელექტრული აბაზანიდან გამოყოფილი მოწყობილობა – გამოტანილი თბომცვლელი, 4 ცალი რეგულირებადი ძაბვის ტრანსფორმატორი, ფაიფურის ცენტრიდანული ტუმბო, ნამუშევარი ხსნარის შემკრები.

დავახასიათოთ ელექტროლიზის კვანძის მოწყობილობა. ამ კვანძის ძირითადი აპარატი არის ელექტროლიზური აბაზანა. ის წარმოადგენს 10 მმ სისქის პოლიპროპილენისაგან დამზადებულ პარალელეპიპედის ფორმის ყუთს, რომელსაც აქვს 18 მმ სისქის დიქტის გარსაცმი, შეკრული სამ რიგად განლაგებული ფოლადის კუთხოვანებით. აბაზანას გარედან შემოხვეული აქვს 50 მმ სისქის ფოლგირებული მინაბამის თბოიზოლაცია. აბაზანის შიგა ზომებია: სიგრძე 1380 მმ, სიგანე 880 მმ, სიმაღლე 1500 მმ. აბაზანის პოლიპროპილენის

კორპუსს ოთხივე მხრიდან მიღებული აქვს პოლიპროპილენისავე ბორტი (სისქე 10 მმ), რომელსაც ეყრდნობა ელექტროდები (ტიტანის ანოდები და გრაფიტის კათოდები). კორპუსის ბორტი გამოიყენება აგრეთვე აბაზანის სახურავის ბორტთან მექანიკურად დასაკავშირებლად ჭანჭიკოვანი შეერთების საშუალებით. სახურავის გაბარიტული ზომებია 1760 მმ, სიგანე 1155 მმ, სიმაღლე 200 მმ. აბაზანაში ერთმანეთის პარალელურად მონაცვლეობით ჩაწყობილია ტიტანის ანოდები და გრაფიტის კათოდები (გაბარიტული ზომები 950მმ x 910მმ). აბაზანა აღჭურვილია ხსნარის შემყვანი და გამომყვანი მილებით და აირორთქლნარევის გამომყვანი მილით. აბაზანის ელექტროენერგიით კვება ხდებოდა გამართველით (ნომინალური დატვირთვა 3200 ამპერი).

საელექტროდე ხსნარის გასაცხელებლად გამოყენებული იყო აბაზანიდან გამოტანილი თბომცველი, რომელიც წარმოადგენს 400 ლიტრი მოცულობის მქონე აბაზანაში ჩაწყობილ 8 ცალ კვარცისბუდიან ნიქრომის ელექტროგამახურებელს. ხსნარის ცირკულაცია ელექტროლიზურ აბაზანასა და გამოტანილ თბომცველს შორის ხდებოდა ფაიფურის ცენტრიდანული ტუმბოთი.

ელექტროლიზის ჩატარებული ცდების საფუძველზე შემუშავებული იყო გამსხვილებული მასშტაბის დახურული ელექტროლიზური აბაზანის მუშაობის შემდეგი რეჟიმი:

1. ჩაკეტილ კონტურში ხსნარის ცირკულაციის სიჩქარე ----- 220-250ლ/სთ
2. გამოტანილ თბომცველში მიწოდებული ელექტრული სიმძლავრე ----- 20 კვტ
3. ხსნარის ტემპერატურა გამოტანილ თბომცველში ----- 97-99°C
4. ხსნარის ტემპერატურა დახურულ აბაზანაში ----- 95-97°C
5. მუშა ხსნარის შემადგენლობა:
 - ა) მანგანუმის სულფატის კონცენტრაცია ----- 90-110 გ/ლ
 - ბ) გოგირდმჟავის კონცენტრაცია ----- 15-25 გ/ლ
6. ანოდური დენის სიმკვრივე ----- 60-100 ა/მ²
7. კათოდური დენის სიმკვრივე ----- 80-120 ა/მ²
8. ძაბვა აბაზანაზე ----- 2,3-2,7 ვ
9. ემდ-ის ანოდური დენით გამოსავალი ----- 100%
10. წყალბადის კათოდური დენით გამოსავალი ----- 100%.

გამსხვილებული მასშტაბის ელექტროლიზური აბაზანის გამოცდის შედეგად მიღებული შედეგები საშუალებას მოგვცემს ოპტიმალურად დავაპროექტოთ ემდ-ისა და წყალბადის მისაღები საცდელ-სამრეწველო აბაზანა.

სამუშაო შესრულებულია საქართველოს შოთა რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის ფინანსური მხარდაჭერით (გამოყენებული კვლევებისათვის სახელმწიფო სამეცნიერო გრანტების 2014 წლის კონკურსის გამარჯვებული პროექტი. შიფრი AR/121/3-170/14).

ლიტერატურა – REFERENCES– ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Н. Джапаридзе. Электролитический диоксид марганца. «Мецниереба», Тбилиси, 1987г.
2. თ. ჩახუნაშვილი, თ. როყვა, ჟ. ქებაძე, მ. დადუნაშვილი, ბ. მახათაძე, ნ. ბუთლიაშვილი. დახურული ელექტროლიზური აბაზანის დამუშავება მანგანუმის დიოქსიდისა და წყალბადის ერთდროული მიღებით. საქართველოს ეროვნული აკადემიის მაცნე. ქიმიის სერია, ტომი 41, №4, გვ. 339-344.
3. თ. ჩახუნაშვილი, თ. როყვა, ზ. ვაწაძე, მ. დადუნაშვილი, ჟ. ქებაძე, ბ. მახათაძე, ნ. ბუთლიაშვილი. თანამედროვე საკონსტრუქციო მასალების კოროზიული გამოცდები მანგანუმის სულფატის შემყვებულ ხსნარებში და მათ ბაზაზე მანგანუმის დიოქსიდისა და წყალბადის მისაღები მსხვილლაბორატორიული ელექტროლიზურის დამუშავება, დამზადება და გამოცდა. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე. ქიმიის სერია, ტომი 42, №2.

**ASSEMBLAGE OF PILOT-DEMONSTRATION PLANT FOR RECEIPT OF
ELECTROLYTIC MANGANESE DIOXIDE AND HYDROGEN AND TESTING OF LARGE-
SCALE ELECTROLYTIC BATH**

T.A.Chakhunashvili, T.V.Rokva, Zh.M.Kebadze, M.T.Dadunashvili, Z.Sh.Vatsadze,
Sh.M.Makhatadze, N.I.Butliashvili

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

SUMMARY

Taking into account the deficiencies of current enterprises of electrolytic manganese dioxide (EMD) production (poor sanitary-hygienic conditions, insufficient safety, considerable material and heat losses), is shown the expediency and necessity of constructive improvement of the bath for EMD receipt. There is described the equipment mounted on the pilot-demonstration plant for EMD receipt. Basic results of carried out large-scale electrolysis tests are given.

**СБОРКА ОПЫТНО-ДЕМОНСТРАЦИОННОГО УСТРОЙСТВА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ
ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА МАРГАНЦА И ВОДОРОДА И ИСПЫТАНИЕ
ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОЙ ВАННЫ УКРУПНЕННОГО МАСШТАБА**

Т.А.Чахунашвили, Т.В.Роква, Ж.М.Кебадзе, М.Т.Дадунашвили, З.Ш.Вацадзе,
Ш.М.Махатадзе, Н.И.Бутлиашвили

*Институт неорганической химии и электрохимии им. Р. Агладзе
Тбилисского государственного университета им. И. Джавахишвили*

РЕЗЮМЕ

Исходя из недостатков существующих производств электролитического диоксида марганца (ЭДМ) (плохие санитарно-гигиенические условия, недостаточная безопасность, существенные материальные и тепловые потери), показана целесообразность и необходимость конструкционного улучшения ванны для получения ЭДМ. Описано оборудование, смонтированное на опытно-демонстрационном устройстве для получения ЭДМ и водорода. Даны основные результаты проведенных укрупненных опытов по электролизу.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ УГЛЕРОДИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ В КАЧЕСТВЕ КАТОДОВ В ПРОЦЕССЕ ОДНОВРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ПОЛУЧЕНИЯ ДВУОКИСИ МАРГАНЦА И ВОДОРОДА

Ц.М.Гагნიძე, Ж.М.Кебаძე, М.М.Болоташвили*, Л.Ш.Какурия, К.Т.Угрелиძე

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

*Институт механики машин им.Р.Двали

Проведены поляризационные исследования углеродистых волокнистых материалов (УВМ) марки ВМН-4 в виде жгута и пиролизных полимерных композитов (ППК) в виде монолитного материала для использования их в качестве катодов при одновременном получении электролизом диоксида марганца и водорода.

Установлено, что наиболее приемлемым катодным материалом для данного процесса являются углеродные волокнистые материалы, на которых водород выделяется с наименьшим перенапряжением при высоких температурах.

Наряду с процессом анодного окисления двухвалентного марганца до диоксида марганца на углеродистых электродах с использованием подкисленного раствора сульфата марганца, небезинтересным является и катодный процесс восстановления водорода на углеродистых электродах.

Цель работы—исследование зависимости перенапряжения выделения водорода от материала углеродистого катода, плотности тока и температуры из раствора ($MnSO_4-120$ г/л, H_2SO_4-20 г/л.), используемого для получения диоксида марганца и модификации.

Исследования проводили в трехэлектродной ячейке с разделными анодным и катодным пространствами. Ячейка имела рубашку, в которую непрерывно подавалась вода из водяного термостата, позволяющего поддерживать постоянную температуру с точностью до $\pm 0.5^\circ C$. Растворы готовили на дистиллированной воде и каждую поляризационную кривую снимали из свежего раствора. Анодом служила платиновая пружина. В качестве электрода сравнения был выбран хлор-серебряный электрод. Катодной поляризации подвергались следующие углеродистые материалы:

1. Углеродные волокнистые материалы (УВМ) марки ВМН-4 в виде жгута.
2. Пиролизные полимерные композиты (ППК) в виде монолитного материала.

Катоды запрессовывали в стеклянную трубку. Нерабочая поверхность рабочего электрода покрывалась пастообразной массой, изготовленной из норакрыла.

Катодная поляризация осуществлялась на потенциостате П-5848 с высоких значений плотностей тока, постепенно переходя к более низким. При наибольшей плотности тока катод поляризовали в течении 30 мин. Измерения проводили через 5-10 минут после установления требуемого тока.

Результаты проведенных экспериментов представлены на рис.1-6.

В исследованных областях температур ($40-80^\circ C$), с повышением плотности тока от 1 до 15 ма/см^2 (рис.1-2) потенциал выделения водорода на электродах из ППК повышается значительно быстрее по сравнению с электродом из УВМ. Так, если для электродов из УВМ потенциал выделения водорода при температурах $40-80^\circ C$ с ростом плотности тока меняется в пределах $0.38-0.63 \text{ В}$ (рис.1), для электродов из ППК эта величина находится в пределах $0.78-0.85 \text{ В}$ (рис.2) и мало меняется с повышением температуры. При температуре

80⁰C для катодов из ППК перенапряжение выделения водорода составляет 0.7V, тогда как для электродов из УВМ всего лишь 0.36V.

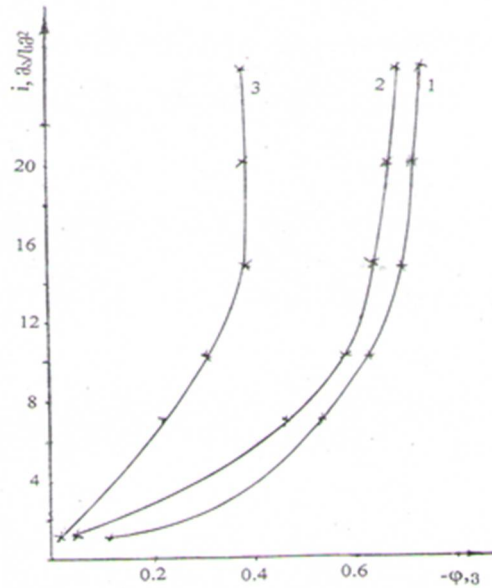


Рис.1. Поляризационные кривые катодного выделения водорода наУВМ в растворе MnSO₄-120г/л, H₂SO₄-20г/л при температурах, ⁰C: 1-40; 2-60; 3-80

Как показывают исследования, выделение водорода на углеродистых материалах при относительно низких температурах (40-60⁰C) характеризуется низкой каталитической активностью (рис.1,2). Каталитическая активность значительно повышается на электродах из УВМ при температурах выше 60⁰C (поляризация снижается на 0.32 V при 80⁰C). Для материалов из ППК с ростом температуры в пределах 40-80⁰C перенапряжение выделения водорода уменьшается незначительно—всего на 0.15V.

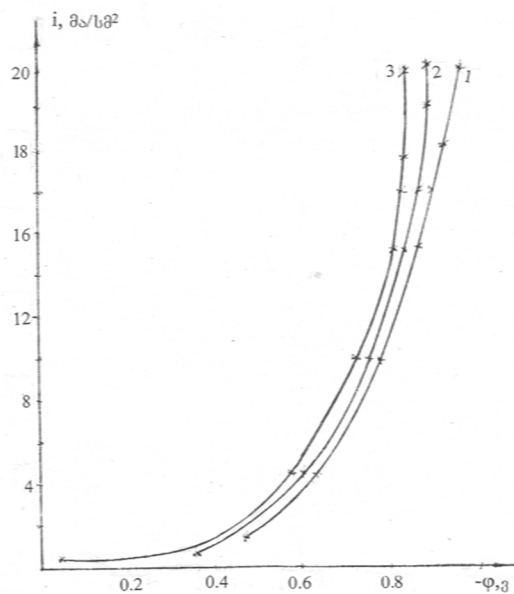


Рис.2. Поляризационные кривые катодного выделения водорода на ППК в растворе MnSO₄-120г/л, H₂SO₄-20г/л при температурах, ⁰C: 1-40; 2-60; 3-80

Сравнительно с меньшим перенапряжением (\sim на 0.47V) выделяется водород, при температуре 80°C на углеродистых волокнистых материалах, чем на пиролизных композитах (рис.3). Тут сказывается метод получения углеграфитового материала. Установлено [1], что с повышением температуры обработки (для ППК это $600-1300^{\circ}\text{C}$, а для УВМ— 2700°C) углеродистого материала перенапряжение выделения водорода снижается, что и подтверждается нашими экспериментами. Последнее обусловливается как уменьшением содержания кислорода в объёме материала, так и увеличением доли упорядоченной фазы [1]. По мнению авторов [2,3] предварительное восстановление поверхности углеродистых материалов приводит к уменьшению перенапряжения выделения водорода.

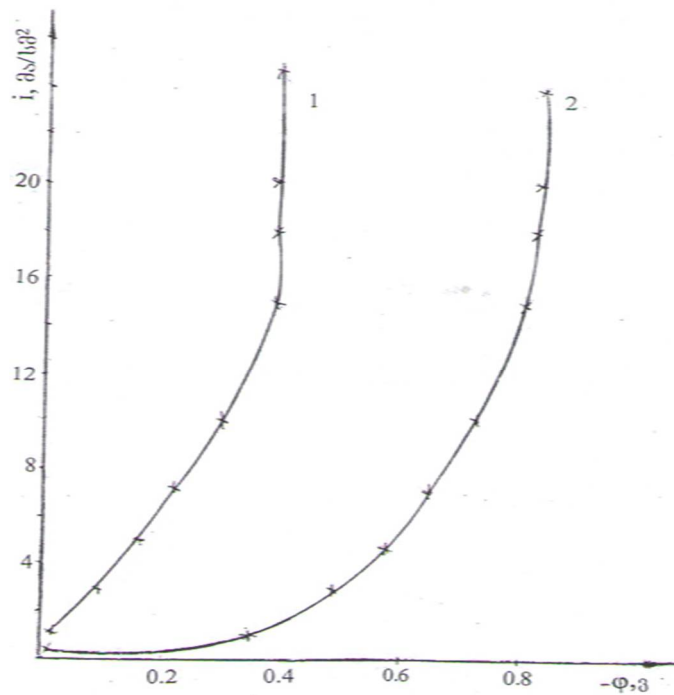


Рис.3. Поляризационные кривые катодного выделения водорода наУВМ (1) и ППК(2) в растворе MnSO_4 -120г/л, H_2SO_4 -20г/л при температуре 80°C

Для установления природы катодной поляризации на электродах из УВМ и ППК, полученные зависимости (рис.1,2) обрабатывались температурно-кинетическим методом. На рис.4 и 5 представлены изопотенциалы $\lg i - f(1/T)$ при $\phi = \text{Const}$. Зависимость логарифма плотности тока от обратной величины абсолютной температуры при различных потенциалах поляризации электрода выражается прямыми линиями.

Расчитанные нами величины энергии активации и их зависимость от потенциала поляризации катодов из исследованных углеродистых материалов приведены в табл.1.

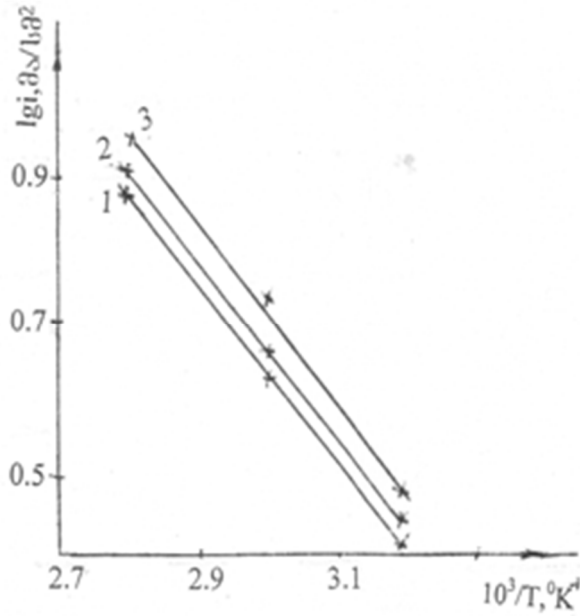


Рис.4. Зависимость логарифма плотности тока от обратной величины абсолютной температуры при различных потенциалах поляризации электрода из УВМ ϕ, V : 1-0.2; 2-0.25; 3-0.3.2-0.6;3-0.7.

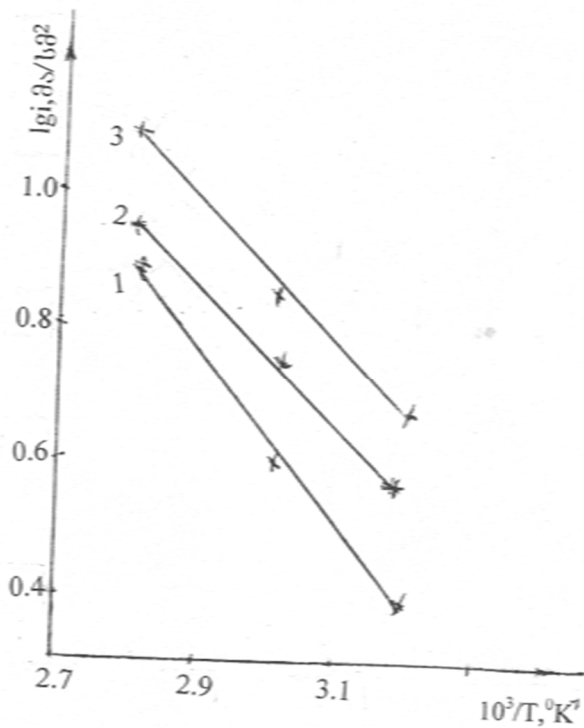


Рис.5. Зависимость логарифма плотности тока от обратной величины абсолютной температуры при различных потенциалах поляризации электрода из ППК ϕ, V : 1-0.5;2-0.6;3-0.7.

Табл.1. Зависимость эффективной энергии активации от потенциала поляризации катодов из углеродистых материалов в растворе: $MnSO_4$ -120 г/л, H_2SO_4 -20г/л

| УВМ | | ППК | |
|-----------|----------------------------|-----------|----------------------------|
| ϕ, v | $\theta, \text{ккал/моль}$ | ϕ, v | $\theta, \text{ккал/моль}$ |
| 0.2 | 8.94 | 0.5 | 10.1 |
| 0.25 | 8.88 | 0.6 | 10.07 |
| 0.3 | 8.71 | 0.7 | 10.0 |

Полученные данные эффективной энергии активации свидетельствуют о том, что на исследуемых углеродистых материалах, как на УВМ, так и на ППК, поляризация обусловлена электрохимической стадией разряда водородных ионов.

На основании экспериментальных данных построены графики зависимости катодного перенапряжения от логарифма плотности тока в исследуемом электролите для электродов из УВМ и ППК при температуре $80^{\circ}C$ (рис.6).

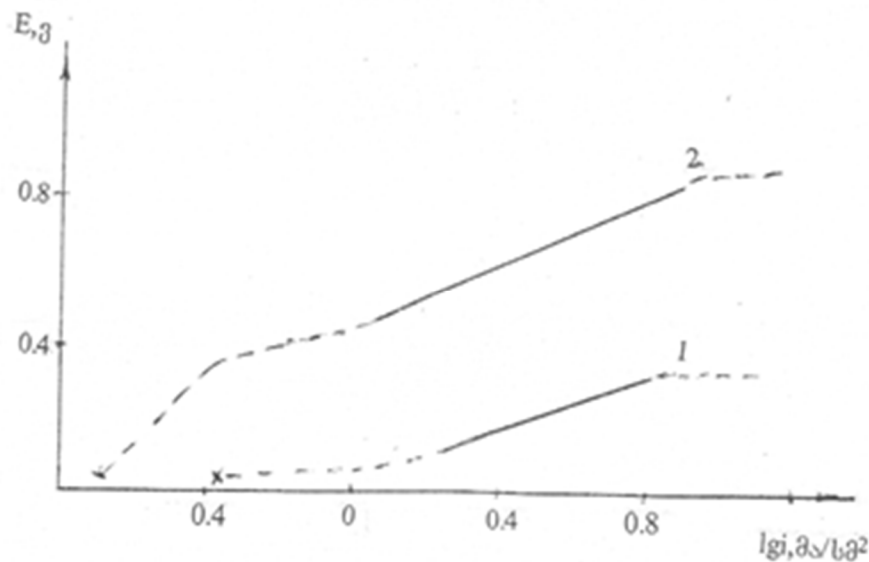


Рис.6. Зависимость перенапряжения выделения водорода на ППК и УВМ от логарифма плотности тока в р-ре $MnSO_4$ -120г/л, H_2SO_4 -20г/л при температуре $80^{\circ}C$

Как видно из рис.6, поляризационные кривые имеют три участка: нижние участки при низких плотностях тока, отвечающих процессу освобождения от поверхностных окислов при потенциалах, близких к стационарному; участки перехода к потенциалу разряда ионов водорода (прямолинейные участки); верхние участки. Из графиков были определены коэффициенты «а» и «в» уравнения Тафеля. Полученные результаты сведены в табл.2.

Табл.2. Коэффициенты уравнения Тафеля для катодного выделения водорода на электродах из УВМ и ППК при $80^{\circ}C$

| $MnSO_4$ -120 г/л, H_2SO_4 -20г/л | | | |
|-------------------------------------|------|------|-------|
| УВМ | | ППК | |
| «а» | «b» | «а» | «b» |
| 0.1 | 0.14 | 0.45 | 0.218 |

Таким образом, проведённые исследования показали, что процесс выделения водорода на исследованных углеродистых материалах при низких температурах характеризуется высоким перенапряжением разряда водорода на них. Однако, с повышением температуры до 80⁰С перенапряжение выделения водорода на электроде из УВМ заметно снижается по сравнению с электродом из ППК. Поэтому в процессе анодного осаждения γ диоксида марганца наиболее приемлемым углеродистым катодным материалом (с более низким перенапряжением выделения водорода), для поставленной цели, является УВМ.

**Работа выполнена при содействии
научного фонда Ш.Руставели (Грузия)
в рамках гранта RT/208/3-200/14.**

ლიტერატურა – REFERENCES– ЛИТЕРАТУРА

1. Гришин В.Г. и др. Электрохимия, 1981, т.17, №5, с.713-717.
2. Васильев Ю.Б. и др. Электрохимия, 1977, т.13, №3, с.440-443.
3. Despic A.R. Croat.chem.acta, 1972, vol.44, #1, p.79-87

INVESTIGATION OF THE POSSIBILITY FOR THE USE OF CARBON MATERIALS AS THE CATHODES AT SIMULTANEOUS ELECTROLYTICAL PREPARATION OF MANGANESE DIOXIDE AND HYDROGEN

Tsisana Gagnidze, Zhiuli Kebabze, Medea Bolotashvili*, Liana Kakuria, Ketevan Ugrelidze
I.Javakhishvili Tbilisi State University, R.Agladze Institute of Inorganic
Chemistry and Electrochemistry
*R.Dvali Institute of Machine Mechanics

SUMMARY

Polarization investigation of carbon fiber material and of pyrolytic polymeric composites were carried out for their possible use as the cathode material at simultaneous electrolytical preparation of manganese dioxide and hydrogen. It was established that the carbon fiber material may be considered as the most acceptable cathode material where hydrogen is separated at high temperature by relatively low over potential.

ნახშირბადოვანი მასალების კათოდებად გამოყენების შესაძლებლობის კვლევა ელექტროლიტური მანგანუმის დიოქსიდის და წყალბადის ერთდროული მიღებისას

ცისანა გაგნიძე, ჟიული ქებაძე, მედეა ბოლოთაშვილი*, ლიანა კაკურია, ქეთევან უგრელიძე
ი.ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
რ.აგლაძის არაორგანული ქიმიის და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი
*რ.დვალის სახელობის მანქანათა მექანიკის ინსტიტუტი

რეზიუმე

ჩატარდა ნახშირბადულ-ბოჭკოვანი მასალის და პიროლიზური პოლიმერული კომპოზიტის პოლარიზაციული კვლევა მათი შესაძლო გამოყენებისათვის საკათოდე მასალად ელექტროლიტური მანგანუმის დიოქსიდის და წყალბადის ერთდროული მიღებისას. დადგენილია, რომ მისაღებ საკათოდე მასალად შეიძლება ჩაითვალოს ნახშირბადულ-ბოჭკოვანი მასალა, რომელზეც წყალბადი მაღალტემპერატურაზე გამოიყოფა შედარებით დაბალი გადაძაბვით.

პიროლოფტალაზინების სინთეზი

ირმა ჯინიყაშვილი, მზია ციცაგი, ქეთევან სარაჯიშვილი,
ქეთევან ებრალიძე, ვლადიმერ ციციშვილი

*ივ.ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი,
პეტრე მელიქიშვილის სახ. ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი.*

წინამდებარე ნაშრომში შესწავლილიაერთდროულად ნიტროჯგუფის და ჰალოგენის შემცველი აზოტოვანი ჰეტეროციკლების დეჰალოგენირების გაუმჯობესებული მეთოდი. ნაჩვენებია აღნიშნული მეთოდის გამოყენების მიზანშეწონილობა შესაბამისი ამინოწარმოებულების მიღების მიზნით.

სინთეზური ხასიათის კვლევები მიმართული ერთ სისტემაში ორი ან რამოდენიმე ჰეტეროციკლის გაერთიანებისკენ აქტუალური და პერსპექტიულია განსაკუთრებით თუ მხედველობაში მივიღებთ იმ გარემოებას, რომ ეს ჰეტეროციკლები დამოუკიდებელ ყურადღებას იმსახურებენ, როგორც უმნიშვნელოვანესი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების საკვანძო სტრუქტურული ფრაგმენტები. ჩვენ შემთხვევაში ინტერესს ამ კვლევების მიმართ ისიც აძლიერებს, რომ ადგილი აქვს π -ელექტრონოდეფიციტური და π -ელექტრონონაჭარბი ჰეტეროციკლების შეუღლებას, რომლებიც გარკვეული ზომით ინარჩუნებენ ავტონომიურობას, რის შედეგადაც ერთი მოლეკულა ჩნდება დიამეტრულად საწინააღმდეგო ბუნების სარეაქციო ცენტრებში, რომელთაგან ერთი ადვილად ჩაებმება ელექტროფილური ხოლო მეორე ნუკლეოფილური ჩანაცვლების რეაქციებში. ეს კი მკვეთრად ზრდის კვლევის პროცესში მიღებული წარმოებულების ასორტიმენტს და ამაღლებს ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების მიზანდასახული სინთეზის წარმატების ალბათობას[1-3].

აღსანიშნავია, რომ როგორც ინდოლი ისე პიროლოფტალაზინებში მასთან შეუღლებული ჰეტეროციკლები (პირაზინი, ფტალაზინი, ქინოქსალინი და ა.შ) ქმნიან უმნიშვნელოვანეს ბუნებრივი თუ სინთეზური ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების და მედიკამენტოზური საშუალებების სტრუქტურულ საფუძველს.

სამუშაოში დასახული ამოცანის წარმატებით გადაჭრისათვის უპირველეს ყოვლისა საჭირო იყო იზომერული პიროლოფტალაზინების სინთეზის მოხერხებული პრეპარატული მეთოდის დამუშავება, რომელიც საშუალებას მოგვცემდა დაგვეგროვებინა მიზნობრივი ჰეტეროციკლური სისტემები აღნაგობის, ქიმიური თვისებების და ბიოლოგიური აქტიობის შესწავლისათვის საკმარისი ოდენობებით.

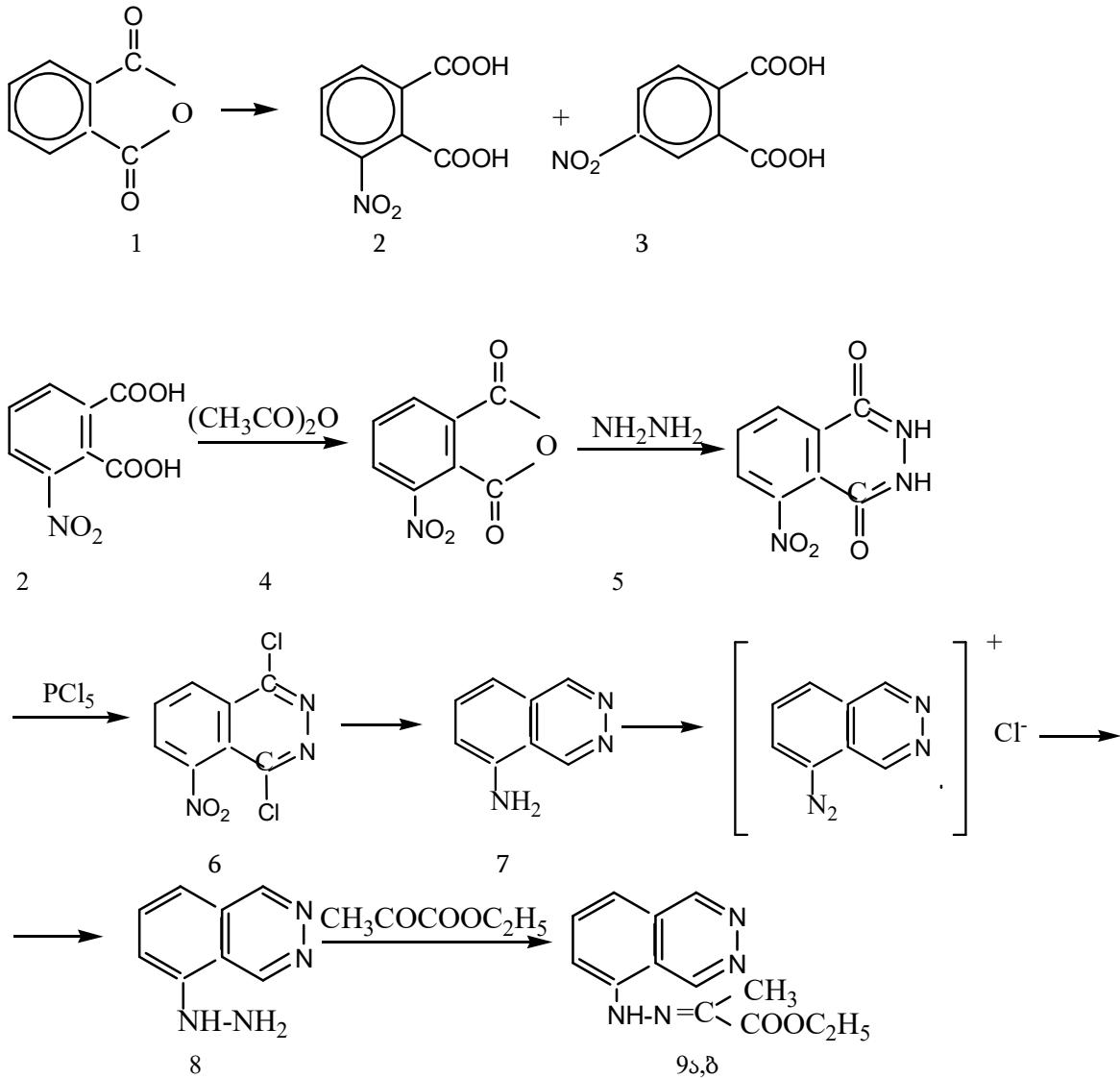
ქვემოთ მოტანილია სქემა №1, რომლის რეალიზაციას მივყავართ მიზნობრივ პიროლოფტალაზინამდე. სქემა ილუსტრირებულია მხოლოდ ერთი იზომერის, კერძოდ 3-ნიტრო-ფტალის მჟავის მაგალითით.

მრავალსაფეხურიანი სინთეზის წარმატებით განხორციელება მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული შუალედური პროდუქტების გამოსავალზე. ამიტომ ზემოთმოყვანილი სქემის რეალიზაციის პროცესში ყურადღება იქნა გამახვილებული ცალკეული სტადიების ოპტიმიზაციაზე.რეაქციის ჩატარების პირობების და შუალედური პროდუქტების გამოყოფის თუ გასუფთავების ხერხების ვარიანტებით მნიშვნელოვნად იქნა გაუმჯობესებული მათი გამოსავლები.

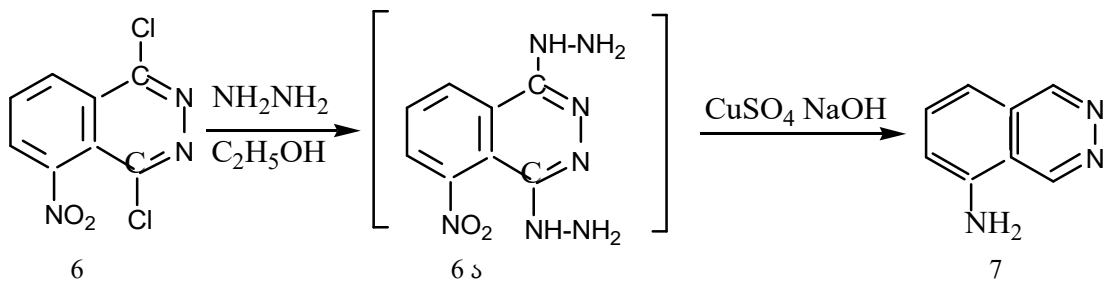
ნიტროქლოროფტალაზინის (6) ჰიდრაზინჰიდრატის სპირტსხნართან დუღებით სინთეზირებულ იქნა შესაბამისი დიჰიდრაზინი(ნა), რომელიც გამოყოფის გარეშე თანმიმდევრულად დამუშავდა სპილენძის სულფატის 10%-იან და ნატრიუმის ჰიდროქსიდის 10%-იან ხსნარებით და ამ გზით გარდაქმნილი იქნა შესაბამისი ამინოწარმოებულში(7) - სქემა№2.

მოულოდნელი იყო დეჰალოგენირების რეაქციის პროცესში ნიტრო ჯგუფის აღდგენა. ჩვენის აზრით ეს განპირობებულია იმით, რომ მოცემულ შემთხვევაში სარეაქციო ნარევი ყოველთვის არის ჰიდრაზინჰიდრატის გარკვეული რაოდენობა და დაბალი დაჟანგულობის ხარისხის მქონე სპილენძის ნაერთები (CuO, Cu სპილენძის სარკის სახით). ამიტომაც ჰიდრაზინის ჯგუფების ელიმინირების პარალელურად მიმდინარეობს ნიტროჯგუფის აღდგენა ამინოჯგუფამდე. ამ მოსაზრების შემოწმების მიზნით ჩატარებული იქნა მოდელური ექსპერიმენტი5-ნიტრო-1,4-დიონის (5) აღდგენა ჰიდრაზინჰიდრატით სპილენძის სარკის თანაობისას და მაღალი გამოსავლით (84%) მიღებულ იქნა შესაბამისი ამინოწარმოებული.

სქემა № 1:



სქემა № 2:



ამრიგად ჩვენს მიერ შემოთავაზებულია 1,4-დიქლორ-5-ნიტროფტალაზინიდან საკვანძო ამინოფტალაზინის სინთეზის მოხერხებული პრეპარატიული მეთოდი. 5-ამინოფტალაზინის დიაზოტირებით მიღებული დიაზონიუმის მარილის აღდგენით შესაბამის ჰიდრაზინამდე (8) და ამ

უკანასკნელის კონდენსაციით პიროყურძნის მჟავას ეთილის ეთერთან დასინთეზებულია პიროყურძნის მჟავას ეთილის ეთერის ფტალაზილჰიდრაზონი სინ- და ანტი-იზომერების ნარევის სახით (9ა,ბ).

ექსპერიმენტული ნაწილი

3-ნიტროფტალის მჟავა (2). 500გ (3,3 მოლ)ფტალის ანჰიდრიდის და 650 მლ კონც. H_2SO_4 (d-1,84) სარეაქციო ნარევი ენერგიული მორევის პირობებში აცხელებენ $80^{\circ}C$ -დე და ფრთხილად უმატებენ 210 მლ მზოლავ აზოტმჟავას (d-1,51) ისე, რომ ტემპერატურა არ ასცდეს $100-110^{\circ}C$. ამის შემდეგ კოლბასამატებენ კონც. აზოტმჟავას (d-1,42) ისე, რომ ტემპერატურა არ ასცდეს $110^{\circ}C$. ამ ტემპერატურაზე რეაქციასაგრძელებენ კიდევ ორ საათს. კოლბის შიგთავსს გაცივების შემდეგამატებენ 1,5 ლ წყალს. შემდეგ 3- და 4-ნიტროფტალის მჟავების ნარევისფილტრავენ. სველ ნალექსავსებენ ჭიქაში, უმატებენ 200მლ წყალს და ენერგიულად უერევენ, ფილტრავენ. ამ დროს 4-ნიტროფტალის მჟავის ძირითადი რაოდენობა ფილტრატში გადადის. ძაბრზე დარჩენილ ნალექს გაცხელებით ხსნიან 250-300 მლ წყალში. ხსნარს ფილტრავენ და აშრობენ. იღებენ 240-245 გ ნედლი 3-ნიტროფტალის მჟავა. აკრისტალევენ წყლიდან. მიიღება 200გ (31%) 3-ნიტროფტალის მჟავა. ლღ.ტ $216-217^{\circ}C$.

4-ნიტროფტალის მჟავა (3). წინა სინთეზში 3-ნიტროფტალის მჟავას გამოყოფის შემდეგდარჩენილ დედა ხსნარს აორთქლებენ. მიღებულ, ნედლ, 4-ნიტროფტალის მჟავასხსნიან 600 მლ აბსოლიტურ ეთანოლში (I), ხოლო 3-ნიტროფტალის მჟავას მონოეთილის ეთერში(II), რომელიც მდგრადია ეთერიფიკაციის მიმართ და კარგად იხსნება ტუტის 10%-იან ხსნარში. როტორამაორთქლებელში ეთანოლის დაცილების შემდეგ დარჩენილ ნაშთს ხსნიან ეთილის ეთერში და 3-ნიტროფტალის მჟავის მონოეთილის ეთერს (II) აცილებენ გამყოფ ძაბრში 10%-იან ტუტის ხსნარით ექსტრაქციით. ზედა ფენას აცილებენ გამხსნელს და ნაშთს ხდიან ვაკუუმში(35-40 მმ ვერცხლისწყლის სვეტისა). ამ გზით მიღებულ 4-ნიტროდიეთილფტალატს (I) საპნავენ კონც. მარილმჟავასთან12 საათის განმავლობაში დუღებით. 4-ნიტროფტალის მჟავას გადააკრისტალევენ 15%-იანი მარილმჟავას ხსნარიდან. მიიღება 205 გ 4-ნიტროფტალის მჟავა ლღ.ტ. $163-164^{\circ}C$.

3-ნიტროფტალის მჟავის ანჰიდრიდი (4). 211გ (1მოლ) 3-ნიტროფტალის მჟავას უმატებენ 190 მლ (2მოლ) ძმარმჟავის ანჰიდრიდს. ნარევის ადუღებენ $10^{\circ}C$ -ზე. ცხელი ხსნარი გადააქვთ ფაიფურის ჯამში და აცივებენ. გამოკრისტალეზულ მასამ აფხვიერებენ როდინში და ფილტრავენ. ნალექს რამოდენიმეჯერ რეცხენ ეთერით და აშრობენ ვაკუუმგამშრობ კარადაში $105^{\circ}C$. მიიღება 170-180გ (90%) პროდუქტი. ლღ.ტ. $163-165^{\circ}C$.

5-ნიტროფტალაზ-1,4-დიონი (5). 95,5გ (0,5 მოლ) 3-ნიტროფტალის ანჰიდრიდს ხსნიან 400 მლ მდულარე ყინულოვან ძმარმჟავაში, ხსნარს აცივებენ $40-50^{\circ}C$ -მდე და ფრთხილად უმატებენ 26 გ (0,52მოლ) ჰიდრაზინჰიდრატს. სარეაქციო ნარევის ადუღებენ უკუმაცივრით 0,5 საათის განმავლობაში, აცივებენ და ფილტრავენ. ნალექს რეცხენ ცხელი ძმარმჟავით და შემდგომ ამისა ხსნიან 5%-იან NaOH-ის ხსნარში. ხსნარს ფილტრავენ და ფილტრატს შეამჟავებენ ძმარმჟავით. მიიღება 94 გ სუფთა 5-ნიტროფტალაზ-1,4-დიონი. ლღ.ტ. $316^{\circ}C$. $^1H-NMR(CCl_4)$ δ 7.90 (1H, gg, $^3J_{7,7}$, $^4J_{1,4}$), 7.97 (1H, $^3J_{7,7}$), 8.24 (1H g.g, $^3J_{7,7}$, $^4J_{1,4}$), 11.37 (2H, m, NH). IR(cm^{-1}): 2846; 2923; 3262

5-ნიტრო-1,4-დიქლორფტალაზინი(6). 10,4 გ (0,05მოლ) 5-ნიტროფტალაზ-1,4-დიონს (5) უმატებენ 31გ PCl_5 -ს და აცხელებენ ზეთის აბაზანაზე $150^{\circ}C$ 4 საათის განმავლობაში. პროდუქტს აცივებენ, აფხვიერებენ ათავსებენ სოქსლეტის ექსტრაქტორში რეაქციის პროდუქტს წვლილავენ ბენზოლით. ბენზოლს აცილებენ როტორამაორთქლებელში, ნაშთს ხსნიან ეთილაცეტატში, ხსნარს ფილტრავენ, აშრობენ. მიიღება 7,5 გ(61,2%) ნედლი 5-ნიტრო-1,4-დიქლორფტალაზინი. ლღ.ტ. $165^{\circ}C$. $^1H-NMR(CCl_4)$ δ 8,22-8,16(1H, m, H-7); δ 8,66-8,57(2H, m, H-5).

5-ამინოფტალაზინი (7). 4,9 გ (0,02 მოლ) 5-ნიტრო-1,4-დიქლორფტალაზინს უმატებენ 12 მლ 100%-იან ჰიდრაზინჰიდრატს, 40 მლ ეთანოლს და ნარევის ადუღებენ უკუმაცივრით 4 საათის განმავლობაში. რეაქციის დამთავრების შემდეგ გამხსნელს აცილებენ როტორამაორთქლებელში, ნაშთს უმატებენ 25 მლ წყალს და ენერგიულად ურევენ. წარმოქმნილ სუსპენზიას აცხელებენ უკუმაცივრით ადუღებამდე და წვეთობით უმატებენ 240 მლ 10% შაბამნის ხსნარს. აგრძელებენ გაცხელებას კიდევ 1,5 საათს და ამავე ტემპერატურაზე უმატებენ 240 მლ 10%-იან NaOH-ის ხსნარს. გაცივების შემდეგ რეაქციის პროდუქტი გადააქვთ გამყოფ ძაბრში და ამოწვლილავენ ეთერით (3-5 ჯერ). გაერთიანებულ ექსტრაქტს აშრობენ უწყლო Na_2SO_4 -ზე, ფილტრავენ და გამხსნელს გადადენიან. ნაშთს აკრისტალევენ ბენზოლიდან. მიიღება 1,78გ (61,3%) 5-ამინოფტალაზინი (7). $^1H-NMR(CCl_4)$ δ 11,46(s, 1H, H-1), δ 9,94(s, 1H, H-4), δ 8,63(m, 2H, H-5), δ 8,34-8,30(m-1H, H-6).

პიროყურმნის მჟავას ეთილის ეთერის 5-ფტალაზილჰიდრაზონი (9a,b).

4.6 გ (0.032 მოლი) 5-ამინოფტალაზინის, 75 მლ წყლის და 20 მლ კონცენტრირებული მარილმჟავის ნარევის აცივებენ 0-5°C და უმატებენ 2,21გ NaNO₂-ის ხსნარს 10 მლ წყალში. ნარევის ურევინ 1 საათის განმავლობაში. რის შემდეგაც უმატებენ ორქლორიანი კალის (ZnCl₂ 2H₂O) ხსნარს 60 მლ კონც. მარილმჟავაში. მორევის აგრძელებენ 3 საათს (0-5°C) და წარმოქმნილ ჰიდრაზინის დიჰიდროქლორიდს ფილტრავენ, ნატრიუმის აცეტატის ნაჯერი ხსნარით არის PH მიჰყავთ 3-მდე და უმატებენ 5,8 გ (0,05 მოლ) პიროყურმნისმჟავის ეთილის ეთერის ხსნარს 5 მლ ეთანოლში. მიიღება 5,4 გ (70%) ტექნიკური ჰიდრაზონი (9a,b).

ლიტერატურა -REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Y.Shi. Peptides.2004, 25, p.1605.
2. P.Pissios;E.Maratos-Flier. Trends Endocrinol. Metab. 2003, 14, p.243.
3. Eriksen E; JohanLind and Gabor Merenyi. J. Chem. Soc., Faraday Trans. I, 1981, 77, 2137-2148

SYNTHESIS OF PIRROLOPHTALAZINES

I.Jinikashvili, M.Tsitsagi, K.Sarajishvili, K.Ebraliidze, V.Tsitsishvili
*PetreMelikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry
ofIvaneJavakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

An improved method for dehalogenation of nitrogen-containing heterocycles containing both halogen and nitro groups has been investigated. Possibility of the expediency of this method in order to obtain the corresponding amino derivatives is shown.

СИНТЕЗ ПИРРОЛОФТАЛАЗИНОВ

И.Джиникашвили, М.Цицаги, К.Сараджишвили, К.Эбралидзе, В.Цицишвили
*Институт физической и органической химии им.П.Меликишвили
Тбилисского государственного университета им. Ив.Джавахишвили*

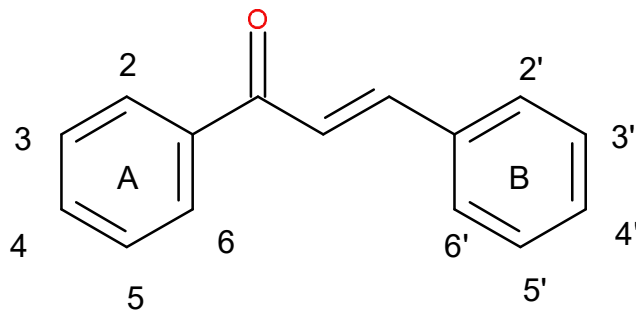
РЕЗЮМЕ

Исучен усовершенствованный метод дегалогенирования азотсодержащих гетероциклов, содержащих как галоген, так и нитрогруппы. Показана возможность целесообразности данного метода для получения соответствующих аминокпроизводных.

ქალკონების ფარმაკოლოგიური თვისებების დამოკიდებულება სტრუქტურებზე

ნანა ჩაგანავა, ლიანა გოგუა
თბილისის სახელმწიფო სამედიცინო უნივერსიტეტი

ქალკონები-1,3-დიფენილ-2-E-პროპინ-1-ონები მცენარეებში გავრცელებული ბუნებრივი ნაერთებია, ბიოაქტივობის ფართო სპექტრით. სტრუქტურულად ისინი ორ A და B არომატულ ბირთვის შეიცავენ, რომლებიც ერთმანეთთან დაკავშირებულია სამი ნახშირბადის შემცველი α , β უჯერი კარბონილური ხილით.



ვინაიდან, ჩვენს მიერ განხილულ პუბლიკაციებში ავტორები ქალკონების დანომვრის განსხვავებულ ვერსიებს იყენებენ, წინამდებარე სტატიაში განხილულ ქალკონებში, ჩამნაცვლებლების მდებარეობა შეესაბამება ზემოთ მოცემულ სტრუქტურაში მითითებულ დანომვრას.

ქალკონები, ძირითადად, ფლავონების (ფლავანოიდების და იზოფლავანოიდების პრეკურსორები) ბიოსინთეზის შუალედური პროდუქტებია. მათი სინთეზის ხელმისაწვდომობა და სიმარტივე განაპირობებს ინტერესს სხვადასხვა ჩამნაცვლებლების მქონე ქალკონების მიღებისადმი მათი ფარმაკოლოგიური აქტივობების შესწავლის მიზნით. მათ ახასიათებთ სიმსივნის საწინააღმდეგო, ანთების საწინააღმდეგო, ანტიბაქტერიული, ანტიფუნგიციდური, ანტიდიაბეტური და სხვა აქტივობები.

წინამდებარე სტატიაში, უკანასკნელი წლების პუბლიკაციების მიხედვით, გაანალიზებულია ურთიერთკავშირი ქალკონების სტრუქტურასა და ფარმაკოლოგიურ აქტივობას შორის.

1. ქალკონების ანტისიმსივნური აქტივობა

1.1. რადიკალშემოჭველი და XO ინჰიბიტორი ქალკონები. ქალკონები, რიგ ბიოაქტივობებს შორის, ამჟღავნებს რადიკალების შებოჭვისა და ფერმენტ ქსანთინოქსიდაზას (XO) ინჰიბირების უნარს. XO ინჰიბიტორები გამოიყენება ჰიპერურიცემიის (სისხლში შარდმჟავას დონის აწვევა) თერაპიისთვის. ეს უკანასკნელი იწვევს კარდიოვასკულარულ და თირკმელის ქრონიკულ დაავადებებს, ართრიტს.

ე.პოფმანის და თანაავტორების მიერ მიღებული ჰიდროქსილირებული ქალკონებიდან მაღალ XO-მინჰიბირებელ უნარს ამჟღავნებენ სამი და მეტი ჰიდროქსილის ჯგუფის შემცველი ნაერთები. ამასთან, პირდაპირი კავშირია ქალკონების ქსანთინოქსიდაზურ აქტივობასა და ჰიდროქსილის ჯგუფის მდებარეობას შორის. A ბირთვის 3-მდგომარეობაში არსებული ჰიდროქსილის ჯგუფით განსხვავებული ქალკონების ბიოაქტივობების შედარებისას განსხვავება აშკარაა. დამატებითი ჰიდროქსილის ჯგუფი 4-მდგომარეობაში უფრო ზრდის აქტივობას. თუმცა, A ბირთვის 2-მდგომარეობაში კიდევ ერთი ჰიდროქსილის ჯგუფის არსებობა განსხვავებულად მოქმედებს ქალკონების ბიოლოგიურ აქტივობაზე: ზოგ შემთხვევაში ეფექტი დადებითია, ზოგში-უარყოფითი. რაც შეეხება ბირთვში ჩამნაცვლებლების მდებარეობის გავლენას აქტივობაზე, აქაც 3'- და 4'-მდგომარეობებში ჰიდროქსილის ჯგუფების არსებობა განაპირობებს აქტივობის გაზრდას, თუმცა ამ ბირთვის 2'-მდგომარეობაში მესამე OH ჯგუფის დაფიქსირებისას აქტივობა ყოველთვის მცირდება. ეს ნაერთები ამჟღავნებენ 2,2-დიფენილ-1-პიკრილჰიდრაზილჰიდრატისრადიკალის (DPPH) შებოჭვის უნარს, საუკეთესო შედეგი აჩვენეს იმ ნაერთებმა, რომლებშიც ჰიდროქსილის ჯგუფები ჩამნაცვლებული იყო A ან B ბირთვის, ან ერთდროულად

ორივე ბირთვის მეზობელ ნახშირბადატომებთან. მაგ. A ბირთვის 3- და 4-, ან B ბირთვის 3'- და 4'-მდგომარეობებში ან ორივე ბირთვის 3-, 3'- და 4-, 4'-მდგომარეობაში[1].

1.2. სიმსივნური უჯრედის ტუბულინშემბოჭველი და ანტიოქსიდანტური აქტივობის მქონე ქალკონები. ბაბასაკებ კბანდგარი და თანაავტორები აღნიშნავენ რომ, ქალკონების ანტისიმსივნური აქტივობა აიხსნება მათ მიერ სიმსივნური უჯრედის ტუბულინის შებოჭვით, რის გამოც ვერ ხერხდება ამ უკანასკნელის პოლიმერიზება მიკროტუბულინში. როგორც მიღებული 3-(2',4'-დიმეთოქსიფენილ)-1-ფენილ-პროპენონის ან 1-ფენილ-3-(3',4',5'-ტრიმეთოქსიფენილ)-პროპენონის და მათი წარმოებულების ხუთი განსხვავებული (თირკმლის კარცინომის, პანკრეატული კარცინომის, ფილტვის ორი სხვადასხვა კარცინომის და სწორი ნაწლავის კარცინომის) სიმსივნური უჯრედის მიმართ ანტისიმსივნური აქტივობის შესწავლამ აჩვენა, ყველაზე მაღალი აქტივობა (90-95%) გამოავლინა 2,4-დიმეთოქსიქალკონმა. ამ ნაერთის A ბირთვში სხვადასხვა ჩამნაცვლებლების (CH_3 ; OCH_3 ; Cl ; Br ; F და NO_2) დაფიქსირებამ აქტივობის შემცირება (15-50%) გამოიწვია. უმნიშვნელო ანტისიმსივნური აქტივობა გამოავლინა 1-ფენილ-3-(3',4',5'-ტრიმეთოქსიფენილ)-პროპენონმა, თუმცა ამ ნივთიერების წარმოებულები, მეთოქსი, ჰიდროქსი, ქლორ და ბრომჩანაცვლებული B ბირთვით მნიშვნელოვან აქტივობას ავლენ (50-95%). განსაკუთრებით აღსანიშნავია 3',4',5'-ტრიმეთოქსიქალკონის ნიტრო წარმოებულები, რომელმაც გამოავლინა 100%-იანი ანტისიმსივნური აქტივობა სტანდარტულ ფლავოპირიდოლოთან და გემციტაბინთან შედარებით. ამასთან, ამ ნივთიერებას, ბევრი სხვა ნიტრონაერთისგან განსხვავებით, არ გააჩნია კარცენოგენური და მუტაგენური აქტივობა. რაც შეეხება 2',4'-დიმეთოქსი- და 3',4',5'-ტრიმეთოქსიქალკონების ანტიოქსიდანტურ აქტივობას, იგი 30-55%-ის ფარგლებში მერყეობს. ჰიდროქსი და მეთოქსი ჯგუფები, ძლიერი ელექტრონდონორული ბუნების გამო, უფრო კარგად ბოჭავენ 2,2-დიფენილ-1-პიკრილჰიდრაზილჰიდრატის რადიკალს (DPPH), ვიდრე ნიტრო ჯგუფი, ან ჰალოგენები, ამდენად, ის ქალკონები რომელთა B ბირთვში ჩანაცვლებულია ჰიდროქსილის ან მეთოქსი ჯგუფები, უფრო მაღალი ანტიოქსიდანტური აქტივობით ხასიათდება [2].

რაც შეეხება ამავე ავტორების მიერ მიღებულ N-ალკილირებული ქალკონებს, უფრო მაღალი რადიკალშემბოჭველიუნარი აქვთ იმ ნაერთებს, რომელთა A ბირთვის 5-მდგომარეობაში, მეორეული ამინის სახით ჰიპერაზინის, ჰიპერიდინის და პიროლიდინის ბირთვებია ჩანაცვლებული. ამასთან, A ბირთვში OH და OCH_3 ჩამნაცვლებლების არსებობა, ასევე განაპირობებს ამ ნივთიერებების მაღალ აქტივობას [3].

ანტიოქსიდანტური აქტივობით ხასიათდება ჰეტეროციკლური ბირთვების შემცველი ქალკონებიც. დილარ კუმარის და თანაავტორების მიერ მიღებულ ინდოლილქალკონებიკარგ ციტოტოქსიკურ აქტივობას ამჟღავნებს ეპითელიალური, პანკრეასის კარცინომას და ანდროგენ-დამოუკიდებელ, პროსტატის ადენოკარცინომას სიმსივნურ უჯრედების მიმართ. ამასთან, არ აქვს მნიშვნელობა ინდოლი ქალკონის A ბირთვს წარმოადგენს თუ B ბირთვს, რაც შეეხება ჩამნაცვლებლების გავლენას, 3',4',5'-ტრიმეთოქსიფენილ, 4'-პირიდილ და N,N-დიმეთილ ჯგუფების შემცველი ნაერთები ბევრად უფრო აქტიურები აღმოჩნდნენ. ინდოლის ბირთვის N-მეთილირებამ კი, აქტივობის შემცირება გამოიწვია[4].

საინტერესოა ის რომ, თუ ზემოთ განხილულ ნაერთებში, ელექტრონდონორული ჯგუფების შეყვანა ქალკონის ბირთვებში ზრდის DPPH შემბოჭველ უნარს, ხოლო ელექტრონაქცეპტორული ჯგუფების პირიქით, ამცირებს. 2-აცეტილფურანის ბირთვისშემცველი დიარილ ქალკონების შემთხვევაში, ყველაზე მაღალი ციტოტოქსიკური და ანტიოქსიდანტური აქტივობებით გამოირჩევიან ის ნაერთები, რომელთა ბირთვის 4'- მდგომარეობაში ელექტრონაქცეპტორული ქლორი, ფთორი ან ნიტროჯგუფია, ან 2'- და 4'-მდგომარეობაში ორი ქლორის ატომია ჩანაცვლებული [5].

1.3. ანთების საწინააღმდეგო აქტივობის მქონე ქალკონები. ტრიპსინი იმ სერინპროტეაზებს მიეკუთვნება, რომლებიც განაპირობებენ ანთებითი პროცესის დაწყებას. ამდენად, ამ ფერმენტის დამთრგუნავი უნარის მქონე ნივთიერებები ანთების საწინააღმდეგო აქტივობით გამოირჩევა. როგორც აღმოჩნდა, N-ალკილირებული ქალკონები არ გამოირჩევიან მაღალი ტრიპსინინიჰიბიტორული უნარით. გამონაკლისის წარმოადგენს A ბირთვის 5-მდგომარეობაში მორფოლინის ბირთვის და B ბირთვის 3'-მდგომარეობაში ფთორის ატომის შემცველი ქალკონი. ფთორის ქლორით შეცვლა იწვევს აქტივობის შემცირებას.

ფერმენტი β -გლუკურონიდაზა ასევე მნიშვნელოვან როლს ასრულებს ანთებითი პროცესის სტიმულირებაში. ამდენად, მნიშვნელოვანია ამ ფერმენტის დამორგუნავი ნივთიერებებიც. N-ალკილირებული ქალკონებს β -გლუკურონიდაზას მაღალი ინჰიბირების უნარი აღმოაჩნდა. განსაკუთრებით აქტიური იყო ის ნაერთები, რომლებიც B ბირთვის 3'-მდგომარეობაში შეიცავენ N-მეთილმორფოლინმეთილ-, პიპერიდინმეთილ- და პიროლიდინმეთილ-ჩამნაცვლებლებს, ხოლო A ბირთვის 5'-მდგომარეობაში ჰალოგენის ატომს[3].

ახარეზვერატროლქალკონებიდან, ყველაზე დიდი ანთების საწინააღმდეგო აქტივობით გამოირჩეოდა A ბირთვის 4- და B ბირთვის 3'-, 4'- და 5'-მდგომარეობაში მეთოქსი ჯგუფის შემცველი ნაერთი[6].

1.4. α -გლუკოზიდაზას ინჰიბიტორული აქტივობის მქონე ქალკონები. ბუნებაში გავრცელებული, პრენილის და გერანილის ჯგუფის შემცველი ქალკონები ამჟღავნებს სიმსივნური უჯრედის α -გლუკოზიდაზას ძალიან მაღალ ინჰიბიტორულ აქტივობას. მაგალითად, იზობავასალკონს და ქსანტოანგელოლს მაღალი ანტიისმისიური და ციტოტოქსიკური აქტივობა ახასიათებთ ნეირობლასტომური უჯრედების წინააღმდეგ.

იზობავაქალკონიდან და ქსანტოანგელოლიდან მიღებულბრენილ და გერანილ ჩამნაცვლებლების მქონე ქალკონებიდან, ჩაუნაცვლებელ ქალკონებთან შედარებით 7-ჯერ მეტ ციტოტოქსიკურობას და 10-ჯერ მეტ ინჰიბიტორულ აქტივობას K-562-ის წინააღმდეგ ის ნაერთები ამჟღავნებენ, რომლებშიც ჩამნაცვლებელი ბირთვის 5'-მდგომარეობაშია. ეს, როგორც ჩანს, განპირობებულია ჩანაცვლებული ჯგუფების დიდი ზომით და ჰიდროფობული ბუნებით. 3-გერანილმონოჩანაცვლებული ქსანტოანგელოლი, ასევე კარგ ციტოტოქსიკურ აქტივობას ამჟღავნებს, თუმცა, ინჰიბიტორული აქტივობა K-562-ის მიმართ 7-ჯერ შემცირებულია. იგივე ტენდენცია შეინიშნება, ტრიმეთოქსილ 3-გერანილ ტრიმეთოქსილ-3-პრენილ ნაერთების აქტივობების შედარებისას. რაც შეეხება დიჩანაცვლებულ ქალკონებს, 3,5-დაპრენილქალკონის აქტივობა K-562-ის მიმართ 9-ჯერ მეტია ჩაუნაცვლებელ იზოლიქვირითიგენინთან შედარებით. 3-პრენილ-5-გერანილ-; 3-გერანილ-5-პრენილ- და 3,5-დიგერანილქალკონების აქტივობა 3,5-დაპრენილქალკონთან შედარებით, 2-6-ჯერ არის შემცირებული. მიღებულ ნაერთებში A ბირთვის 2- და 4-მდგომარეობაში და B ბირთვის 4'-მდგომარეობაში არსებული ჰიდროქსილის, მეთოქსი ჯგუფებით შეცვლა ამცირებს აქტივობის მაჩვენებლებს. როგორც ჩანს, უფრო მრავალატომიანი ჩამნაცვლებლის არსებობა ამ მდგომარეობაში, ხელს უშლის პრენილის და გერანილის ჩამნაცვლებლების სივრცით ორიენტაციას, კარგი ინჰიბირებისთვის [7, 8].

2. ოქსიდაზა-B (MAO-B)-ინჰიბიტორი ქალკონები

მონოამინოოქსიდაზა-B ინჰიბიტორები, L-დოფასთან და/ან დოფამინთან ერთად გამოიყენება ალცჰეიმერის დაავადების დროს. როგორც ქლორირებული თიოფენქალკონების ბიოაქტივობის შესწავლამ აჩვენა, MAO-B ინჰიბიტორული აქტივობა მაღალი ჰქონდათ იმ ნაერთებს, რომელთა ფენილის ბირთვის პარა-მდგომარეობაში ჩანაცვლებული იყო ლიპოფილური, ელექტრონდონორული მეთილის, ეთილის, მეთოქსი და დიმეთილამინო ჯგუფები, იმავე მდგომარეობაში ქლორის ან ბრომის ატომების არსებობა ასევე ზრდიდა ინჰიბიტორულ აქტივობას, ხოლო პარა-მდგომარეობაში ელექტრონაქცეპტორულმა ნიტრო- და ტრიფთორმეთილის ჯგუფებმა კი, შეამცირა MAO-B ინჰიბიტორული აქტივობა [9].

3. თიროზინ-ინჰიბიტორული აქტივობის მქონე ქალკონები

თიროქსინაზა, რომელიც ასევე ცნობილია როგორც პოლიფენოლოქსიდაზა, ბუნებაში ფართოდ გავრცელებული სპილენძის იონების შემცველი ფერმენტია, რომელიც მონაწილეობს მელანიზაციის პროცესში. იგი გარდაქმნის L-თიროზინს 3,4-დიჰიდროქსიფენილალანინში (L-დოფა) და ამ უკანასკნელს დაჟანგვით გარდაქმნის დოფაქინონში. დოფაქინონი პოლიმერიზაციის შედეგად წარმოქმნის მელანინს, რაც იცავს კანს ულტრაიისფერი დასხივებისგან. თუმცა, ამ დროს გამოშვებული პიგმენტის გადაჭარბებულმა დაგროვებამ, შესაძლოა ისეთი დერმატოლოგიური დარღვევები გამოიწვიოს, როგორიცაა ქლოასმა, ლენტიგო, ასაკობრივი ლაქები, ანთებითი ჰიპერმელანოზისი და ტრაჰემა-

გამომწვევი ჰიპერპიგმენტაცია. ამდენად, მნიშვნელოვანია თიროზინ-ინჰიბიტორული აქტივობის მქონე ნაერთების მიღება.

რადაკრიშნანის და თანაავტორების მიერ მიღებული ფენილ- და ნაფთილამინოქალკონებიდან, ყველაზე კარგი თიროზინ-ინჰიბიტორული აქტივობა (75,51%) გამოამჟღავნა 2E-3(4-ამინო-2-მეთოქსიფენილ)-1-(ჰიდროქსიფენილ)პროპ-2-ენ-1-ონმა. რაც შესაძლოა აიხსნას ბირთვში ძლიერი ორთო-მეთოქსი და პარა-ამინო ჩამნაცვლებლის არსებობით, რომლებიც მნიშვნელოვნად ცვლიან ბირთვის ელექტრონულ სიმკვრივეს, რაც თავის მხრივ განაპირობებს ფერმენტის აქტიური მხარის სპილენძის იონების უკეთ შებოჭვას. A ფენილის ბირთვის ნაფთილის ბირთვით ჩანაცვლება ამცირებს ინჰიბიტორულ აქტივობას.

როგორც ჩანს, ნაფთილის ბირთვი სტერიულ დაბრკოლებას ქმნის, სპილენძის იონების შებოჭვისას. თუმცა, ნაფთილამინოქალკონის B ბირთვის 4'-მდგომარეობაში მეთოქსი ჯგუფის და 3'-მდგომარეობაში ამინო ჯგუფის შეყვანა ზრდის ინჰიბიტორულ პოტენციალს (58,5%)[10].

რაც შეეხება ჰიდროქსილირებული ნაფთილქალკონების სტრუქტურის აქტივობაზე გავლენას, A ბირთვის 2-,5- და 3-, 5-მდგომარეობებში ჰიდროქსილის ჯგუფების მქონე ნაერთები ყველაზე მაღალი აქტივობით გამოირჩევიან. ჰიდროქსილირებული ნაფთილქალკონებიდან, ყველაზე დიდი თიროქსინაზა-ინჰიბიტორული აქტივობა გამოამჟღავნა (2E)-3(3,5-დიჰიდროქსიფენილ)1-(3-ჰიდროქსინაფტალინ-2-ილ)პროპ-2-ენ-1-ონმა(68,5%). ჰიდროქსილის ჯგუფები ამ ნივთიერებებში ახორციელებს არა მხოლოდ ნუკლეოფილურ შეტევას ფერმენტის სპილენძის იონებზე, არამედ პირდაპირ არის ჩართული კატალიზის დროს პროტონების გადატანაში, რის შედეგადაც ხდება თიროქსინაზას ინაქტივაცია. უფრო მეტიც, ინჰიბიტორული აქტივობა უფრო მაღალია იმ შემთხვევაში თუ ჰიდროქსილის ჯგუფი ჩანაცვლებულია პარა-მდგომარეობაში. ნაფთილქალკონი 2- და 4-მდგომარეობაში ჰიდროქსილის ჯგუფებით, ბევრად უფრო მაღალ აქტივობას ამჟღავნებს, ვიდრე 5-ჰიდროქსი-2-(ჰიდროქსიმეთილ)-4-H-პირან-4-ონი (kojic acid), რაც შეიძლება აიხსნას მისი მოლეკულური ჩონჩხის მაქსიმალური მსგავსებით L-თიროქსინაზას მოლეკულურ სტრუქტურასთან. B ბირთვში, ელექტრონაქცეპტორული ჯგუფები ზრდის A და B ბირთვის კარბონილური ხიდის β ნახშირბადის ელექტროფილურობას და ამდენად, ბიოაქტივობასაც. ძლიერი ელექტრონდონორული ჰიდროქსი ჯგუფის არსებობა ორთო-მდგომარეობაში და ელექტრონაქცეპტორული ნიტრო ჯგუფის პარა-მდგომარეობაში, მნიშვნელოვნად ცვლის B ბირთვის ელექტრონულ სიმკვრივეს და შესაძლოა იწვევს შედარებით მაღალ თიროქსინაზა-ინჰიბიტორულ პოტენციალს (55,5%). თუმცა, ჰიდროქსილის ჯგუფის პარა მდგომარეობაში არსებობა ამცირებს აქტივობას (51,2%) ელექტრონდონორული ჯგუფების გავლენა, ელექტრონაქცეპტორულ ჯგუფებთან შედარებით უფრო ძლიერია, ვინაიდან ისინი ზრდიან არომატული ბირთვის ელექტრონულ სიმკვრივეს [11].

ფაიტჰ სომნეზის და სხვების მიერ მიღებული 4-(ფენილურენილ) და 4'-(ფენილურენილ/თიოურენილ)ქალკონებიდან, თიროქსინაზა ინჰიბიტორული აქტივობა მხოლოდ 4-(ფენილურენილ)ქალკონებმა გამოამჟღავნეს, რაც შეეხება, იგივე ელექტრონდონორული ჩამნაცვლებლების მქონე 4'-(ფენილურენილ/თიოურენილ)ქალკონებს, მათ საერთოდ არ აღმოაჩნდათ ფერმენტის აქტიური მხარის სპილენძის იონებთან კომპლექსის წარმოქმნის უნარი და შესაბამისად, თიროზინ-ინჰიბიტორული აქტივობა [12].

4. ანტიპარაზიტული აქტივობის მქონე ქალკონები

4.1. ანტიამებური აქტივობის მქონე ქალკონები. ამებიაზისი კუჭ-ნაწლავის ტრაქტის დაავადებაა, რომელსაც იწვევს პარაზიტი *Entamoeba histolytica*. ამ დაავადების სამკურნალოდ გამოიყენება მეტრონიდაზოლი, რომელიც კარცინოგენულია და თან ამ პრეპარატით მკურნალობას მთელი რიგი გვერდითი ეფექტებიც აქვს (სპერმატოზოიდების დაზიანება, კრუნჩხვები, ცენტრალური ნერვული სისტემის დაავადებები, სისხლი შარდში). საადა ლეეზა ზაიდის და თანაავტორების მიერ სინთეზირებული N-ჩანაცვლებულ ეთანამინის შემცველი 18 ქალკონიდან, 12 მეტრონიდაზოლზე ეფექტურ ანტიამებურ აქტივობას ავლენდა. A ბირთვის პარა მდგომარეობაში ელექტრონაქცეპტორული ნიტრო-ჯგუფის შემცველი ნაერთების IC₅₀ მნიშვნელობა მეტრონიდაზოლის მაჩვენებელზე (1,86 μM) მაღალი იყო, ანუ ეს ქალკონები მეტრონიდაზოლზე სუსტ ანტიამებური აქტივობას ამჟღავნებენ. ქალკონს, რომელიც შეიცავს ჰიპერიდინოეთოქსი გვერდით ჯაჭვს A ბირთვში და მეთოქსი ჯგუფს B

ბირთვის პარა-მდგომარეობაში, ყველაზე მცირე IC₅₀ მაჩვენებელი აქვს (0,03μM), შესაბამისად ის ყველაზე მაღალი ანტიამებური აქტივობით ხასიათდება. აქტივობა ოთხჯერ შემცირდა, როცა A ბირთვში ჰიპერმეთილირებული გვერდითი ჯაჭვი ჩანაცვლდა დიმეთილამინოეთოქსი ჯაჭვით. ყველაზე დაბალი აქტივობები გამოამჟღავნეს იმ ქალონებმა, რომლებიც A ბირთვში შეიცავენ მორფოლინოეთოქსი გვერდით ჯაჭვს [13].

4.2 ანტიფლარული აქტივობის მქონე ქალონები. ლიმფატური ფილარიაზის გამომწვევი ფლარული პარაზიტია. როგორც აღმოჩნდა, ბუნებრივი თუ სინთეზური ქალონები ეფექტურად მოქმედებენ ლიმფატური პარაზიტების წინააღმდეგ. როგორც სანდუკ პაპაჰკარის და თანაავტორების მიერ, მიღებული სულფამიდური ქალონების, ლიმფატური ფლარული პარაზიტის *Brugia malayi*-ს წინააღმდეგ *in vitro*, ანტიფლარული აქტივობის შესწავლამ აჩვენა, ის ქალონები, რომლებიც B ბირთვის 4'-მდგომარეობაში ელექტრონაქცეპტორულ ჯგუფებს შეიცავენ (F, Cl, Br, NO₂), გამოირჩევიან მაღალი აქტივობით. ეს ჯგუფები ხელს უწყობს ქალონის მიერთების რეაქციას ნებისმიერი ფერმენტის ნუკლეოფილურ გვერდით ჯაჭვთან, რაც შესაძლოა გავლენას ახდენს ფერმენტის აქტიურობაზე, იწვევს მეტაბოლურ სტრესს და შედეგად ანტიფლარულ აქტივობას. ბრომის პარა-მდგომარეობაში არსებობა მნიშვნელოვნად ზრდის ქალონის აქტივობას. ნაერთების ლიპოფილურობა ასევე წარმოადგენს ნაერთის აქტივობის კრიტიკულ პარამეტრს. ის ქალონები, რომლებიც ლიპოფილურ ალკილ ჯგუფებს შეიცავენ, ამჟღავნებენ მაღალ ანტიფლარულ აქტივობას. განსაკუთრებით აქტიური ის სულფამიდური ქალონებია, რომლებიც ერთდროულად შეიცავენ როგორც ლიპოფილურ ალკილჯგუფებს, ასევე-ელექტრონაქცეპტორულ ნიტრო ჯგუფს პარა მდგომარეობაში [14].

4.3 ანტილეიშმანიური აქტივობის მქონე ქალონები. ლეიშმანიოზის საწინააღმდეგო აქტივობის შესწავლის მიზნით, თაიას გაბან პასალასკუასა და თანაავტორების მიერ მიღებულ პრენილირებული ქალონებში, O-გერანილ, O-იზობრენილ ან O-ფარნესილ ჯგუფები ჩანაცვლებულია B ბირთვის 2'- ან 3'-მდგომარეობაში. პრეკურსორი ქალონები, რომლებიც ბირთვის 2'- და 3'-მდგომარეობაში შეიცავენ ჰიდროქსილის ჯგუფებს, მათგან მიღებული პრენილბული ქალონებისგან განსხვავებით, არ ამჟღავნებენ ლეიშმანიციდურ აქტივობას და გამოირჩევიან ძალიან მაღალი ციტოტოქსიკურობით, მაშინ როცა, 2'-მდგომარეობაში O-ფარნესილ ჯგუფის შემცველი ქალონი ბევრად მაღალი აქტივობით და დაბალი ციტოტოქსიკურობით გამოირჩევა. ეს ფაქტი შეიძლება აიხსნას, ნაერთის ლიპოფილურობის გაზრდით, ანუ ნივთიერების შეღწევალობის გაზრდით პარაზიტებში, მათი უჯრედ-მემბრანული ბარიერის დაძლევის ხარჯზე. მნიშვნელოვანია ჩამნაცვლებლის მდგომარეობაც, იმავე ჩამნაცვლებლის არსებობა 3'-მდგომარეობაში, ლეიშმანიციდური აქტივობას ამცირებს, ციტოტოქსიკურობას კი, ზრდის [15].

5. სინერგისტიკული ანტიფუნგიციდური აქტივობის მქონე ქალონები

Candida albicans-ყველაზე ფართოდ გავრცელებული პათოგენური სოკოა იმპაციენტებში, რომელთაც სუსტი იმუნიტეტი ან ბაქტერიული ფლორის დისბალანსი აქვთ. ამ სოკოს სამკურნალოდ, ყველაზე აქტიურად, ფლუკონაზოლი იხმარება. თუმცა, პრეპარატი არაეფექტურია ხელმეორედ გამოყენების შემთხვევაში. როგორც ბოლო წლების კვლევებმა აჩვენა, ქალონები სინერგისტიკული, სოკოს საწინააღმდეგო აქტივობით ხასიათდება. ეფექტური და დაბალტოქსიკური სინერგისტიკული ანტიფუნგიციდური ნივთიერებების მიღების მიზნით, იან-ჰუა ვანგის და თანაავტორების მიერ მიღებული ქალონები არ ხასიათდებიან ანტიფუნგიციდური აქტივობით, მაგრამ მათ შეუძლიათ აღადგინონ ფლუკონაზოლ-რეზისტენტული *C.albicans*-ის მგრძობელობა ფლუკონაზოლის მიმართ. იმ ქალონებიდან, რომელთა A ბირთვის 6-მდგომარეობაში ჰიდროქსილის და 2-მდგომარეობაში მეთოქსი ჯგუფია ჩანაცვლებული, უკეთეს აქტივობას ამჟღავნებენ ისინი ქალონები, რომლებშიც B ბირთვად ფენილის ნაცვლად ჰეტეროციკლია (თიოფენი, ფურანი, პირიდინი). რაც შეეხება 2-ჰიდროქსი- და 4-ჰიდროქსიქალონებს, მათგან ყველაზე აქტიური 2-ჰიდროქსი-4-მეთოქსიქალონი აღმოჩნდა. უნდა აღინიშნოს, რომ A ბირთვის 2- ან 4-მდგომარეობაში ერთი ჩამნაცვლებლის მქონე ქალონები ინდიფერენტულები არიან. გამონაკლისს წარმოადგენენ ის ქალონები, რომლებსაც 2-მდგომარეობაში ფთორი, ქლორი ან ნიტრო ჯგუფია ჩანაცვლებული [16].

განხილული ქაღალდების მისაღებად ძირითადად გამოიყენება კლაიზენ-შმიდტის კონდენსაცია, ალდოლური კონდენსაცია და ფრიდელ-კრაფტსის რეაქცია. ჩვენ შეგნებულად არ ვამახვილებთ ყურადღებას განხილულ პუბლიკაციებში აღწერილი ქაღალდების მიღების ექსპერიმენტულ ნაწილზე, თუმცა, ვფიქრობთ საინტერესო იქნება ქაღალდების სინთეზისთვის გამოყენებული მეთოდების მოკლე ანოტაციები [17,18]:

- კლაიზენ-შმიდტის კონდენსაცია. არომატული ალდეჰიდების და კეტონების ფუძე-ან მჟავა-კატალიზური კონდენსაცია ჰომოგენურ ან ჰეტეროგენურ პირობებში. მჟავა კატალიზატორებად გამოიყენება: $AlCl_3$, $RuCl_3$, TiO_2/SO_4^2 , ფუძე კატალიზატორებად: KOH , $NaOH$, K_2CO_3 , $Ba(OH)_2$ და MgO ;
- ფრიდელ-კრაფტსის რეაქცია. ქაღალდები მიიღება ფენოლის აცილირებით. ფენოლი ქმნის A ბირთვს, ხოლო მაცილირებელი აგენტი B ბირთვს და სამი ნახშირბადისგან შემდგარ ხიდს, რომელიც ამ ორ ბირთვს აკავშირებს ერთმანეთთან;
- ჰეისის შეწყვილების რეაქცია. არილჰალიდის რეაქცია სტიროლთან CO -ს თანაობისას, პალადიუმის კატალიზატორის გამოყენებით;
- სუზუკი-მაიაურას რეაქცია. ორგანობორანების და არომატული ჰალიდების ჯვარედინი შეწყვილების რეაქცია ფუძის თანაობისას პალადიუმის კატალიზატორის გამოყენებით. სინთეზის პირველი ვარიანტი გულისხმობს არილბორმჟავას რეაქციას სინამოილქლორიდთან $Pd(PPh_3)_4$ -ის, $CsCO_3$ -ის და უწყლო ტოლუოლის მონაწილეობით. მეორე ვარიანტი-სტიროლბორმჟავას რეაქციას ბენზოილ ქლორიდთან $Pd(PPh_3)_4$ -ის, $CsCO_3$ -ის და უწყლო ტოლუოლის მონაწილეობით;
- შეწყვილების რეაქცია. ეკვიმოლური რაოდენობის ფენილაცეტილენისა და ბენზალდეჰიდის ურთიერთქმედება HBr -ის და $BimOTf$ -ის თანაობისას $100^\circ C$ -ზე 12 საათის განმავლობაში;
- ქაღალდების ერთსაფეხურიანი სინთეზი. პირველადი სპირტი და შესაბამისი კეტონი თავსდება CrO_3 -თან ერთად. ეს უკანასკნელი, სპირტს ჟანგავს ალდეჰიდად, რომელიც ურთიერთქმედებს ნარევიმ არსებულ კეტონთან, საბოლოო ქაღალდის წარმოქმნით;
- მიკროტალღური სინთეზი. მეთილკეტონის და არომატული ალდეჰიდის ეკვიმოლური რაოდენობა იხსნება 40%-იანი ნატრიუმის ტუტის სპირტხსნარის მინიმალურ რაოდენობაში და მიღებული ხსნარი თავსდება მიკროტალღური გამოსხივების ქვეშ, 60-120 წამის განმავლობაში. მიკროტალღური მეთოდით ქაღალდების მიღება შესაძლებელია გამხსნელის გარეშეც. კატალიზატორად გამოიყენება იოდით გაჟღენთილი ალუმინის ოქსიდი. მოლეკულური იოდი მოქმედებს როგორც ლუისის მჟავა და ხელს უწყობს როგორც არილკეტონის ენოლიზაციას, ასევე ბენზალდეჰიდის კარბონილური ჯგუფის გააქტიურებას ნუკლეოფილური შეტევისადმი;
- მყარი მჟავა კატალიზური სინთეზი. სინთეზი ხორციელდება, 1,2-დიქლორეთანში, ფენილაცეტილენის და ბენზალდეჰიდის ეკვიმოლური რაოდენობის მიკროტალღური დასხივებით, 18-25 წუთის განმავლობაში, მყარი მჟავა კატალიზატორის-ამბერლისტ-15-ის თანაობისას.
- სინოგაშირას იზომერიზაციული შეწყვილება. ამ მეთოდით ქაღალდები მიიღება პროპარგილის სპირტის და ელექტრონაქცეპტორული ჯგუფების შემცველ არილჰალიდების მიკროტალღური დასხივებით 8-25 წუთის განმავლობაში, კატალიზატორად $PdCl_2(PPh_3)_2$ გამოიყენება.

ქაღალდები, მარტივი $C_6-C_3-C_6$ სისტემით, ამჟღავნებენ უმეტესწილად მაღალ ანტიისმისივურ, ანთების საწინააღმდეგო, ანტიბაქტერიულ, ანტიფუნგიციდურ და სხვა აქტივობებს. მათი სტრუქტურების, ფარმაკოლოგიურ აქტივობებზე დამოკიდებულების შესწავლამ აჩვენა, რომ A და B ბირთვებში სხვადასხვა ელექტრონდონორული ან/და ელექტრონაქცეპტორული ჩამნაცვლებლების შეყვანა, ან ამ ბირთვების ჩანაცვლება ჰეტეროარომატული ბირთვებით დიდ გავლენას ახდენენ მათ ბიოლოგიურ აქტივობებზე. შესაბამისად, არ არის გასაკვირი რატომ ეთმობა ასეთი დიდი ყურადღება ამ ნივთიერებების მიღებას, მათი ფარმაკოლოგიური აქტივობების კვლევის მიზნით.

ლიტერატურა -REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Emily Hofmann, Jonatan Webster, Thuy Do, Read Kline, Lindsey Snider, Quintin Hauser, Grace Higginbottom, Austin Campbell, Lili Ma, Stefan Paula. Hydroxylated chalcones with dual properties: Xanthine oxidase inhibitors and radical scavengers. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 2016, 24, p. 575-587
2. babasaheb P. Bandgar, Shrikant S. Gawande, Ragini G Bodade, Jalinder V Totre. Synthesis and biological evaluation of simple methoxylated chalcones as anticancer, anti-inflammatory and antioxidant agents. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 2010, 18, p. 1364-1370
3. Babasaheb P. Bandgar, Sachin A. Patil, Rajesh N. Gacche, Balaji L. Korbadi, Balwant S. Hote, Santosh N. Kinkar, Shivkumar S. Jalde. Synthesis and biological evaluation of nitrogen-containing chalcones as possible anti-inflammatory and antioxidant agents. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2010, 20, p.730-733
4. Dalip Kumar, N.Maruthi Kumar, Kanako Akamatsu, Eriko Kusaka, Hiroshi Harada, Takeo Ito. synthesis and biological evaluation of indolyl chalcones as anti tumor agents. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2010, 20, p.3916-3919
5. Mohamed rayees Ahmad, V. Girija Sastry, Nasreen Bano, Syed Anwar. Synthesis of novel chalcone derivatives by conventional and microwave irradiation methods and their pharmacological activities. *Arabian Journal Of chemistry* 2011 xxx, xxx-xxx article in press
6. Wenbo chen, Xiangting Ge, Fengli Xu, Yali Zhang, Zhanguo Liu, Jialing Pan, Jiao Song, yuarong Dai, Jianmin Zhou, Jianpeng Feng, Guang Liang. design, synthesis and biological evaluation of parallel Aza resveratrol-chalcone compounds as potential anti-inflammatory agents for the treatment of acute lung injury. *Bioorganic & Medicinal Chemistry letters* 2015, 25, p. 2998-3004.
7. Hao-meng Wang, Li Zhang, Jiang Liu, Zhao-Liang Yang, Hong-Ye-Zhao, Yao Yang, Di Shen, Kui Lu, Zhen ChuanFan, Qing-Wei yao, Yong-Min Zhang. synthesis and anti-cancer activity evaluation of novel prenylated and geranylated chalcone natural products and their analogs. *European Journal of Medical Chemistry*. 2015, 92, p.439-448.
8. Sascha Venturelli Ph.D,M.D., Markus Burkard Ph.D., Martin Biendl Ph.D., Ulrich M. leuer M.D., Jan Frank Ph.D., Christian Busch M.D. Prenylated chalcones and flavonoids for prevention and treatment of cancer. *Nutrition* 2016, 32, p.1171-1178.
9. Bijo Mathew, Abitha Haridas, Gulbek Ucar, Ipek Baysal, Adebayo A. Adeniyi, Mahmoud E.S. Soliman, Monu Joy, Giyha Elizabeth Mathew, Baskar Lakshmanan, Venkatesan Jayaprakash. Exploration of chlorinated thienyl chalcones: A new class of moniamine oxidase-B inhibitors. *International Journal of Biological Macromolecules*. 2016, 91, p.680-695
10. Sini Radakrishnan, Ronald Shimmom, Costa Conn, Antony Baker. Design, synthesis and biological evaluation of hydroxyl substituted amino chalcone compounds for antityrosinase activity in B 16 cells. *Bioorganic chemistry* 2015, 62, p.117-123
11. Sini Radakrishnan, Ronald Shimmom, Costa Conn, Antony Baker. Development of hydroxylated naphthylchalcones as polyphenol oxidase inhibitors: Synthesis, biochemistry and molecular docking studies.
12. Fatih Sonmez, Sedar Sevmeszler, Alparslan Atahan, Mustafa Ceylan, Dudu Demir, Nahit Gencer, Oktay Arslan, Mustafa Kucukislamoglu. Evaluation of new derivatives as polyphenol oxidase inhibitors. *Bioorganic & medicinal Chemistry* 2011, 21, p. 7479-7482.
13. Saada Leeza Zaidi, Sonam Mittal, Maitreyi S. Rajala, Fernando Avecilla, Mohammad Husain, Amir Azam. Synthesis, characterization and antimicrobial activity of chalcones bearing N-substituted ethanamine tail. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2011, 98, p. 179-189
14. Sander P. bahekar, Sneha V. Hande, Nikita R. Agrawal, Hermant S. Chandak, prianka S. Bhoj, Kalyan Goswami, M.V.R. Reddy. Sulfonamide chalcones: Synthesis and in vitro exploration for therapeutic potential against *Brugia malayi*. *European Journal of Medicinal Chemistry* 2016, 124, p. 262-269
15. Tais Gaban Passalacqua, Luiz Antonio Dutra, Leticia de Almeida, Angela Maria Arenas Velasquez, Fabio Aurelio Esteves Torres, Paulo Renato Yamasaki, Mariana Bastos dos Santos, Luis Octavio Regasini, Paul A.M.Lichels, Varderlan da Silva Bolzani, Marcia A.S. Graminha. Synthesis and

- evaluation of novel prenylated chalcone derivatives as anti-leishmanial and anti-tryposomal compounds. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2015, 25, p. 3342-3345
16. Yan-Hua Wang, Huai-Huai dong, fei Zhao, Jie Wang, Fang yan, Yuan-Yuan Jiang Yong-Sheng Jin. The synthesis and synergistic antifungal effects of chalcones against drug resistant *Candida albicans*. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2016, 26, p. 3098-3102
17. Debarshi Kar Mahapatra, Sanjay Kumar Bharti, Vivek Asati. Calcone scaffolds as anti-infective agents: Structural and molecular target perspectives. *European Journal of Medicinal Chemistry* 2015; 101, p 496-524.
18. Chetana B. patil, S. K. Maharajan, Suvarna A. Katti. Calcone A Versatile Molecule. *J. Pharm. Sci. & Res.* 2009, Vol (3), p.11-22.

RELATIONSHIP BETWEEN CHALCONES STRUCTURES AND THEIR PHARMACOLOGICAL PROPERTIES

Nana Chaganava, Liana Gogua
Tbilisi State Medical University

SUMMARY

Chalcones form a class of compounds that belong to flavonoid family and are widely distributed in plants. Their simple structure and the ease of preparation make chalcones attractive scaffold for synthesis of a large number of derivatives enabling the evaluation of effects of different functional groups on biological activities. In this review, structure pharmacological activity relationships have been highlighted.

ЗАВИСИМОСТЬ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ХАЛКОНОВ ОТ ИХ СТРУКТУРЫ

Н.Т.Чаганова, Л.Д.Гогуа
Тбилисский государственный медицинский университет

РЕЗЮМЕ

Халконы – промежуточные продукты биосинтеза флавонов. Из-за несложных методов синтеза, а также их простых структур, в последние годы возрос интерес к синтезу халконов, с целью изучения их биологической активности. В статье рассмотрена зависимость фармакологических свойств этих соединений от их структуры.

**ფსევდობათხვევადი შრის ჰიდროდინამიკის კომპიუტერული სიმულაცია
ბრანულირებული ბარიტების ალბენის პროცესისთვის**

შალვა ანდლულაძე, ანა ბერეჟიანი, მალხაზ ბერეჟიანი, გიორგი მჭედლიშვილი
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ფსევდობათხვევადი (ე.წ. “მდულარე”) შრის აპარატები ეფექტურად გამოიყენებიან ქიმიურ, მეტალურგიულ, სასურსათო და სახვა მონათესავე ტექნოლოგიებში სითბო- და მასაცვლის, ქიმიური და ფაზური გარდაქმნის პროცესების ინტენსიფიკაციისათვის.

აქტუალურია საინჟინრო გამოთვლების პროგრამული საშუალების დამუშავება მოძრავი მარცვლოვანი ფენების ჰიდროდინამიკური რეჟიმების გამოთვლებისა და მოდელირებისათვის ზოგად ფუნდამენტალურ ფენომენოლოგიურ ბაზაზე, რომლის გამოყენება მოხერხდება კონკრეტული პროცესების ანალიზისა და პროექტირებისას, მათ შორის ავტომოდელურ – უძრავი ფენისა და წატაცების რეჟიმებისთვის.

მარცვლოვანი ფენებში სითხეების (აირების) დინების შესწავლა მიეკუთვნება ე.წ. შერეულ ამოცანებს – ერთი მხრივ ნაკადი მიედინება მარცვლოვან ელემენტებს შორის შიდა არეებში, ამავე დროს იგი გარსემოედინება მარცვლებს.

სითხის შედარებით მცირე სიჩქარისას მარცვლოვანი ფენა უძრავია. ამ დროს სითხე უბრალოდ მიედინება (იფილტრება) ფენაში. გარკვეული კრიტიკული სიჩქარის შემდეგ, როდესაც ჰიდრაულიკური წინააღმდეგობის ძალა აჭარბებს ფენის წონას, ფენა ამოძრავდება, მისი ფოროვნება და სიმაღლე იზრდება, ფენა ხდება მოძრავი და გადადის “მდულარე” მდგომარეობაში, მკვეთრად გამოსატყული ზედა საზღვრით. სიჩქარის შემდგომი ზრდით ფოროვნება იზრდება, როდესაც სიჩქარე აღწევს ახალ კრიტიკულ ზღვარს, ნაწილაკები წარიტაცებიან ნაკადით (პნევმოტრანსპორტი).

საინჟინრო გამოთვლების ალგორითმი შედგენილია შემდეგი საანგარიშო დამოკიდებულებების საფუძველზე [1-3]:

სფეროსთან მიახლოებული ნაწილაკებისთვის (ფორმის ფაქტორი $\Phi \approx 1$, ყრილი ფენის ფოროვნება $\varepsilon \approx 0,4$) ფსევდო გათხვევადების სიჩქარის განსაზღვრისთვის გამოიყენება ფორმულა:

$$Re_{FB} = \frac{Ar}{1400 + 5.22\sqrt{Ar}} \quad (1)$$

სადაც Re , Ar შესაბამისად რეინოლდსის და არქიმედის კრიტერიუმებია:

$$Re_{FB} = \frac{w_{FB} \cdot d \cdot \rho_m}{\mu_m} \quad (2)$$

$$Ar = \frac{d^3 \rho_m (\rho - \rho_m) g}{\mu_m^2} \quad (3)$$

d – ნაწილაკის დიამეტრია, ρ , ρ_m – შესაბამისად ნაწილაკის და გარემოს (სითხის, აირის) სიმკვრივე, μ_m – გარემოს სიბლანტე, g – თავისუფალი ვარდნის აჩქარება.

თავისუფალი დაღეჭვის პირობიდან ნაწილაკის დაკიდების (წატაცების) კრიტიკული სიჩქარის განსაზღვრა შესაძლებელია ერთიანი საინტერპოლაციო ფორმულით:

$$Re_p = \frac{Ar}{18 + 0.575\sqrt{Ar}} \quad (4)$$

$$Re_p = \frac{w_p \cdot d \cdot \rho_m}{\mu_m} \quad (5)$$

ფსევდო გათხვევადი ფენის ფოროვნება შეიძლება გამოთვლილი იქნას ფორმულით:

$$\varepsilon = \left(\frac{18Re + 0.36Re^2}{Ar} \right)^{0.21} \quad (6)$$

შესაბამისად, ფსევდო გათხვევადი ფენის სიმაღლე h უძრავი ფენის სიმაღლესთან h_0 დაკავშირებულია დამოკიდებულებით:

$$h = \frac{1 - \varepsilon_0}{1 - \varepsilon} h_0 \quad (7)$$

შედგენილია უნიფიცირებული კომპიუტერული ელექტრონული ცხრილი საინჟინრო გამოთვლებისა და შედეგების ვიზუალური წარმოდგენისათვის. საწყისი პირობები და გამოთვლების შედეგები გამოსახულია რეალური ფიზიკური-საინჟინრო ერთეულებით, რაც აადვილებს მის გამოყენებას კონკრეტული პროცესების ანალიზისა და პროექტირებისთვის. საწყის პირობებს წარმოადგენენ: აპარატის გეომეტრიული ზომები (სიმაღლე H და დიამეტრი D), სამუშაო რეჟიმები (ტემპერატურა t , წნევა P), მარცვლების დიამეტრი d , მყარი ფაზის საერთო მასა m და სიმკვრივე ρ . აირების ფიზიკო-ქიმიური მახასიათებლები იანგარიშება ტემპერატურისა და წნევის მიხედვით შემდეგი ფორმულებით:

$$\rho_m = \rho_{ref} \frac{P \cdot (t_{ref} + 273)}{P_{ref} \cdot (t + 273)} \quad (\text{კლასპერონის განტოლება}) \quad (8)$$

$$\mu_m = \mu_{ref} \frac{273 + C}{t + 273 + C} \left(\frac{t + 273}{273} \right)^{3/2} \quad (\text{საზერლენდის ფორმულა}) \quad (9)$$

სადაც ინდექსით ref აღნიშნულია პარამეტრების მნიშვნელობები შესაბამის რეჟიმებისთვის, როგორც წესი - ნორმალური პირობებისთვის ($t_{ref}=0^{\circ}\text{C}$, $P_{ref}=1.0135$ ბარი, წყლის ორთქლისთვის $t_{ref}=100^{\circ}\text{C}$).

აირების ნარევისთვის შესაბამისი გასაშუალოებული მნიშვნელობები იანგარიშება შემადგენელი კომპონენტების მთლიანი (მოცულობითი) წილების მიხედვით:

$$\rho_m = \sum y_i \rho_i \quad (10)$$

$$\frac{\overline{M}}{\mu_m} = \sum \frac{y_i M_i}{\mu_i} \quad (11)$$

მყარი მარცვლების გასაშუალოებული სიმკვრივე ასევე იანგარიშება ფორმულის (10) ანალოგიური დამოკიდებულებით კომპონენტების წილების x_i მიხედვით.

უნიფიცირებული კომპიუტერული მოდელი გამოყენებულია მდულარე შრის რეაქტორში ჰიდროდინამიკური რეჟიმის ანალიზისთვის გრანულირებული ბარიტების ალდგენის პროცესში [4], შემდეგი სამუშაო პირობებისთვის:

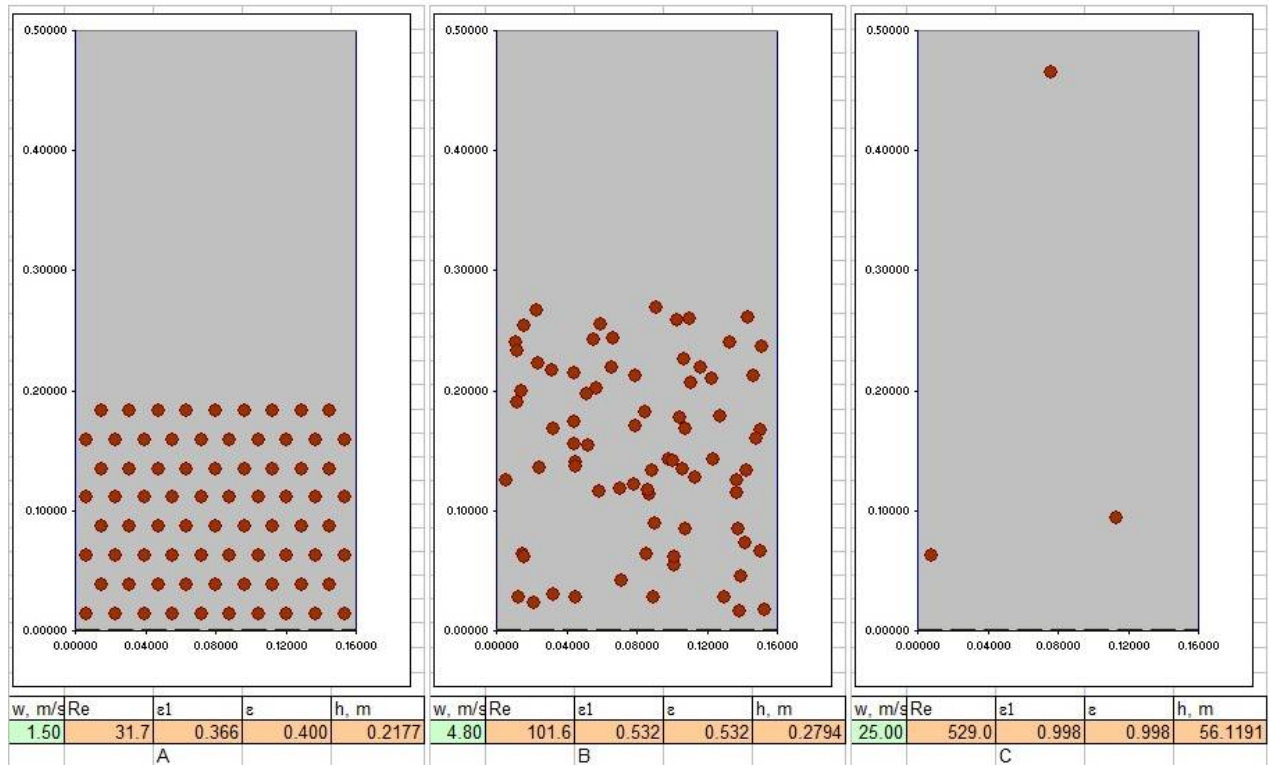
გრანულები შედგებიან ბარიტისგან, კოქსისგან სხვადასხვა თანაფარდობით, გათვალისწინებულია მინარევების – თაბაშირის, კაოლინის, რკინის ჟანგის, კირქვის, კვარცის, თაბაშირის შემცველობა. გრანულების ზომებია 1–3 მმ.

პროცესი ტარდება $700\text{--}1100^{\circ}\text{C}$ ტემპერატურის ინტერვალში. მდულარე შრე იქმნება ნახშირჟანგის CO და წყალბადის H_2 ნარევით. კომპიუტერულ მოდელში გათვალისწინებულია სხვა აირადი კომპონენტების: ნახშირორჟანგის, აზოტის, ჟანგბადის, მეთანის, წყლის ორთქლის არსებობა.

კომპიუტერული მოდელირება (სიმულაცია) ხორციელდება სხვადასხვა საწყისი მნიშვნელობებისთვის. ხდება როგორც გამოთვლების შედეგების წარმოდგენა რიცხვითი მნიშვნელობებით, ასევე ვიზუალიზაცია, ხოლო განმეორებითი ციკლური გამოთვლებისას მიღება ანიმაციური სურათიც, რომელიც თვისობრივად გამოხატავს მარცვლების ქაოტურ მოძრაობას ფსევდოგათხევადებული ფენაში, ხოლო აპარატის გეომეტრიული ზომები და ფენის სიმაღლე გამოსახულია რეალური მნიშვნელობებით.

ნახაზზე წარმოდგენილია კომპიუტერული სიმულაციის გრაფიკული ილუსტრაცია სხვადასხვა რეჟიმებისთვის. გამოთვლების ალგორითმი და გრაფიკული წარმოდგენა ინარჩუნებს ავტომოდელურობას ნებისმიერი პირობებისთვის: A - უძრავი ფენა, B - განვითარებული მდულარე ფენა, C - წატაცების რეჟიმი.

დამუშავებული პროგრამული საშუალება ეფექტურად გამოიყენება რეალური ტექნოლოგიური პროცესების მოდელირებისათვის, ასევე სპეციალისტების სწავლებისთვის. ამ თვალსაზრისით გამართლებულია საინჟინრო გამოთვლებისა და მოდელირების კომპიუტერული პროგრამების წარმოდგენა ელექტრონული ცხრილების სახით [5,6], რაც იძლევა მათი გამოყენების საშუალებას პრაქტიკულად ნებისმიერ კომპიუტერზე საგანგებო მათემატიკური პაკეტების ინსტალაციის გარეშე.



ლიტერატურა -REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г. Касаткин – Основные процессы и аппараты химической технологии. изд. 10-ое, М.: “Альянс”, 2004.
2. Романков П.Г., Фролов В.Ф., Флисюк О.М. - Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии СПб.: ХИМИЗДАТ, 2009, 544 с.
3. Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter harriott - Unit Operations of Chemical Engineering. 7-th Edition, McGrew Hill, Inc., 2005, 1130 p.
4. ვ. რუხაძე - ბარიტების აღდგენის ზოგიერთი კინეტიკური კანონზომიერებისა და მინარევთა გავლენის გამოკვლევა მღელარე შრის რეაქტორში // მეცნიერება და ტექნოლოგიები, 2003, 10-12, გვ. 117-1179.
5. მ. ბერეჟიანი, მ. თავართქილაძე, ა. ბერეჟიანი – თბოცვლის პროცესების კომპიუტერული მოდელირება. საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციის “ინფორმაციული ტექნოლოგიები 2008“ მოხსენებათა კრებული, თბილისი, 27-28.08.2008, გვ. 158-161.
6. მ.გ. ბერეჟიანი, დ.გ. კოტრიკაძე - სითხის დინების ჰიდროდინამიკური რეჟიმების კომპიუტერული სიმულაცია. საერთაშორისო სამეცნიერო-პრაქტიკული კონფერენციის "თანამედროვე სინთეზური ტექნოლოგიები და გარემოს დაცვა" შრომების კრებული, II ნაწ., აწერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ქუთაისი, 2016 წლის 19-20 მაისი, გვ. 612-615

COMPUTER SIMULATION OF THE FLUIDIZED BED HYDRODYNAMICS IN GRANULAR BARITES REDUCTION PROCESS

Shalva Andguladze, Ana Berejiani, Malkhaz Berezhiani, Giorgi Mchedlishvili

SUMMARY

Computer model as an Excell spreadsheet is compiled for engineering calculations and visual presentation of the fluidized bed hydrodynamic regimes. As an example the process of reduction of granular barite is considered.

КОМПЬЮТЕРНАЯ СИМУЛЯЦИЯ ГИДРОДИНАМИКИ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ ГРАНУЛИРОВАННЫХ БАРИТОВ

Ш.Н.Андгуладзе, А.М.Бережiani,М.Г.Бережiani, Г.С.Мчедлишвили

Грузинский технический университет

РЕЗЮМЕ

Составлена компьютерная модель в виде электронной таблицы для инженерных расчетов гидродинамики псевдоожигенного слоя и визуального отображения режимов. В качестве примера рассмотрен процесс восстановления гранулированных баритов.

TO THE QUESTION OF HETEROGENEOUS INHIBITION OF FLAME

Giorgi Bezarashvili, Kakhaber Sulaberidze, David Petviashvili, Lali Gurchumelia*, Manana Kekenadze

Ivane Javakhishvili Tbilisi state University

Faculty of Exact and natural Sciences, Institute of Physical and Analytical Chemistry

*Rafiel Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry

The article is devoted to the theoretical investigation of heterogeneous inhibition of flame propagation by solid particles of Na_2SO_4 . Inhibition of Hydrogen and Methane combustion had been selected as model processes. The calculation results show that heterogeneous removal of active centers of reaction may really compete with significant gaseous steps only in lower temperature region of preheat zone: $T_0 < T < 600 \text{ K}$. At higher temperature conditions the effectiveness of heterogeneous chemical inhibition of combustion is quite low.

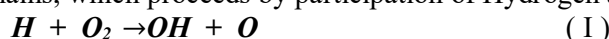
Study of influence of inhibiting additives on chemical reaction in combustion conditions is one of the important tasks of modern physical chemistry. Determination of dependence of critical concentration of the inhibitor on the characterizing parameters of combustible mixture and inhibiting additives gives opportunity to be revealed inherent regularities of inflammation processes [1]. In this point of view study and simulation of inhibition of chemical reactions occurring in the flame zone represents a substantial interest in the further development of the theory of combustion. [2,3].

Study of impacts of active additives on the combustion processes is practically important task. It is directly connected to the avoid problems of fire-fighting and combustible mixture flaming. [4]. The successful resolution of scientific research task of new fire-fighting means requires detailed study of inhibition of flame. The problems of creation of fire-fighting theoretical bases are connected to the same.

Over the past decades for the suppression of combustion processes has been successfully used special fire extinguishing powders produced based on the inorganic salts (halogenides, sulphates, carbonates, hydrocarbonates), and mineral raw materials. They are distinguished by activity and universal action. [4-7]. At the same time the detailed mechanism of their particles impact hasn't yet been properly studied. Isn't finally identified individual role of homogenous and heterogenous factors, also contribution of interaction with inhibitor of separate active centers of combustion reaction in the flame quenching process. The relation of effects of "thermal" and "chemical" factors in total term of inhibition are not properly investigated. [3,5]. The scientific researches related to the mentioned factors may give us qualitative new data about flame suppression and set out new ways of general problems solutions of inhibition of reactions.

At present it is considered that by the large particles of inorganic salts powders (diameter of particles $d > 30$ micrometer) during the inhibition of laminar flame the especial importance is given to heterogeneous chemical factor; namely, heterogeneous removal of leading active centers of reaction – atoms and radicals on the surface of solid particles. [3,4]. Unfortunately, so far there is not unified and clear understanding about in which temperature regions of the flame is conducted effective inhibition of reaction: in the lower temperature [8], average or high temperature regions. [9]. The goal of the presented work is to contribute in the clarification of the mentioned issues based on the theoretical calculations.

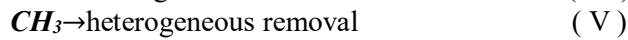
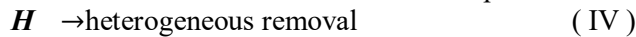
Heterogeneous inhibition of the combustion of Hydrogen and Methane had been selected as model processes (kinetic schemes of high-temperature oxidation of H_2 and CH_4 are well identified nowadays). In accordance with the existed perceptions in the Hydrogen oxidation process the most important step is branching of the reaction chains, which proceeds by participation of Hydrogen atoms [10, 11] :



What about Methane high temperature oxidation process, here one of the important steps are reactions of Formaldehyde formation, because subsequent transformation of Formaldehyde provides branching of the reaction chains [12] :



As we can see the mentioned steps are carried out by participation of H atoms and CH_3 radicals. Therefore, the heterogeneous chemical inhibition of the combustion process by solid particles implies heterogeneous removal of these active centers on the surface of the particles. :



Let us consider the temperature profile of so called “preheat zone” of laminar premixed flame. In accordance with Zel'dovich[9], in the mentioned zone the temperature drop may be described by exponential function:

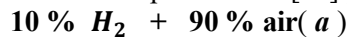
$$T = T_0 + (T_1 - T_0) e^{-x/l} , \quad (1)$$

Wherein

$$l = \frac{\lambda}{c_p \rho_0 v_0} . \quad (2)$$

Here T_0 is initial (inflow) temperature of reaction mixture, T_1 – maximal temperature of preheat zone, x - distance perpendicular to the flame front, l - conventional thickness of preheat zone, λ - Average thermal conductivity of the mixture, c_p - specific heat of the gas, v_0 - fundamental velocity of combustion.

Initial composition of the combustible mixture were the following (the relevant experimental data for these mixtures was obtained by us earlier in the publication [13]):



For the Hydrogen combustion reaction $v_0 = 20 \text{ cm/sec}$, but in case of Methane $v_0 = 45 \text{ cm/sec}$ [14] (total pressure is equal to 1 atmosphere). As for the physical characteristics of gas mixtures they were calculated according to the monograph[15]. The obtained results are represented in Fig. 1.

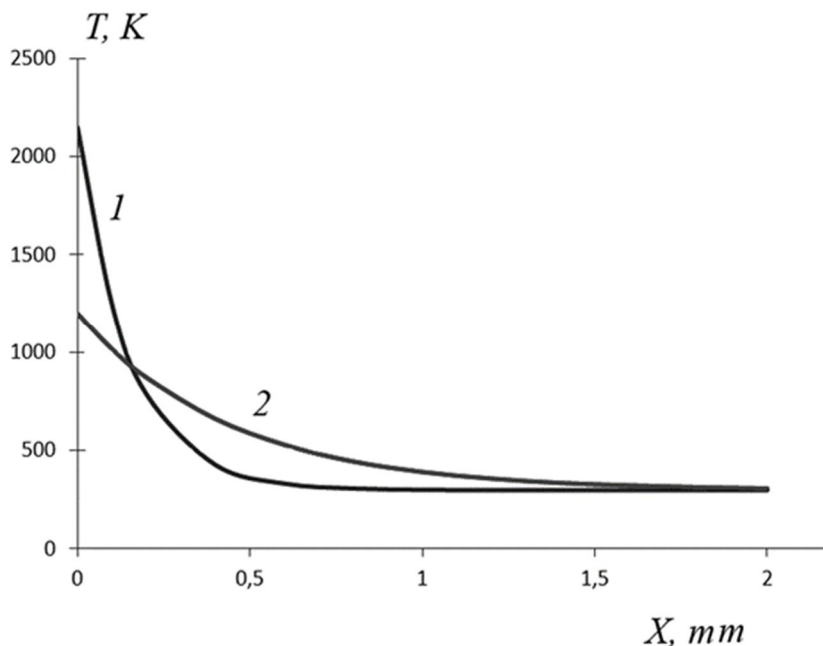


Fig. 1. Temperature profiles in the preheat zone :

1. “Methane – air “ flame;
2. “Hydrogen – air” flame

For effectiveness of inhibition it is required to fulfil the following criterion: velocities of removal of active centres shall be equal or exceed to the velocities of the gaseous steps, proceeded with participation of these centres. In the given case these criterion may be written as follows:

$$\frac{k(IV)}{k(I)[O_2]} \geq 1 , \quad (3)$$

$$\frac{k(V)}{k(II)[O_2]} \geq 1 , \quad (4)$$

$$\frac{k(V)}{k(III)[O]} \geq 1 , \quad (5)$$

where $k(i)$ values correspond to the rate constants of the abovementioned steps, but values in the square brackets correspond to the molar concentrations of molecular and atomic Oxygen. If we designate the ratio written in the left sides of the equations (3) – (5) by symbol α , after taking the logarithm we receive the following expression for effective inhibition:

$$\lg \alpha \geq 0 . \quad (6)$$

Temperature dependence of rate constants of homogenous steps (I)– (III) is described by Arrhenius equation [12]:

$$\begin{aligned} k(I) &= 1.41 \cdot 10^{14} \exp\left(-\frac{16700}{RT}\right), & \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ k(II) &= 1.20 \cdot 10^{11} \exp\left(-\frac{10000}{RT}\right), & \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ k(III) &= 3.42 \cdot 10^{13} \exp\left(-\frac{3200}{RT}\right), & \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \end{aligned}$$

What about heterogeneous steps (IV) – (V) for the approximate expression of their rate constants we can use Frank-Kamenetskiy formula [16] (in the case of solid particles with spherical form):

$$k(\text{het.}) = \frac{\varepsilon U D \rho_s S}{3 \varepsilon U + 4 D \rho_s S} S W. \quad (7)$$

Here ε is coefficient (probability) of heterogeneous removal of active centre, U - average velocity of thermal motion of this centre in gaseous phase, D - diffusion coefficient of the centre, ρ_s - density of solid particle, S - specific surface of solid particles, W - weight concentration of particles in the reaction mixture.

The variation of molecular Oxygen concentration to the temperature in the preheat zone of flame may be expressed as follows [9]:

$$\frac{[O_2] - [O_2]_0}{[O_2]_f - [O_2]_0} = \frac{T - T_0}{T(\text{max}) - T_0}, \quad (8)$$

where $[O_2]_0$ is the oxygen content in the initial mixture, $[O_2]_f$ - oxygen content in the combustion products, $T(\text{max})$ - maximal temperature of flame.

What about oxygen atoms, their concentration connection with gas temperature has more complicated nature. Mathematical modelling conducted by us earlier showed that in case of flame propagation in Methane-air mixtures this relationship is approximately described by power function:

$$[O] \approx [O]_{\text{max}} \left[\frac{T - T_0}{T(\text{max}) - T_0} \right]^4, \quad (9)$$

where $[O]_{\text{max}}$ is maximal concentration of Oxygen atoms in the flame zone.

Quantitative computations were performed for Na_2SO_4 powder particles, the inhibition ability of which had been experimentally studied earlier by us [13].

For H_2/air mixture -

$$S = 70 \text{ m}^2/\text{kg} ; \quad W = 0,5 \text{ kg} / \text{m}^3 .$$

For CH_4/air mixture -

$$S = 45 \text{ m}^2/\text{kg} ; \quad W = 1,5 \text{ kg} / \text{m}^3 .$$

We note that here W corresponds to the content limit of solid particles in the reaction mixture which is enough for suppression the flame propagation.

The calculation results are presented in Fig. 2 - 4. There is shown that in case of Methane as well as Hydrogen combustion expression (6) is fulfilled to 550 – 600 K temperature for two different values of ε coefficient. This means that heterogeneous removal of active centers of reaction while flame inhibition by powders of inorganic salts may really compete with significant gaseous steps only in lower temperature region of preheat zone:

$$T_0 < T < 600 \text{ K} .$$

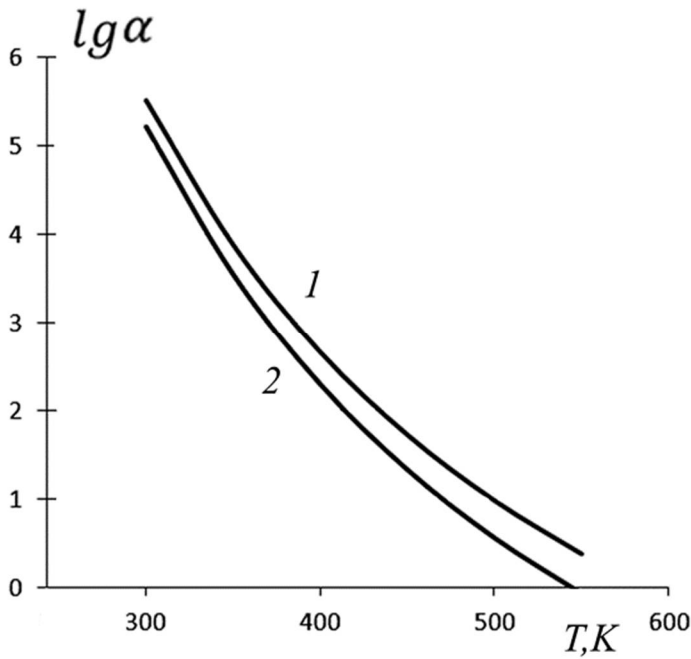


Fig. 2. Change of α – coefficient versus temperature for “Hydrogen – air” flame: $\epsilon = 1$; 2. $\epsilon = 0.01$

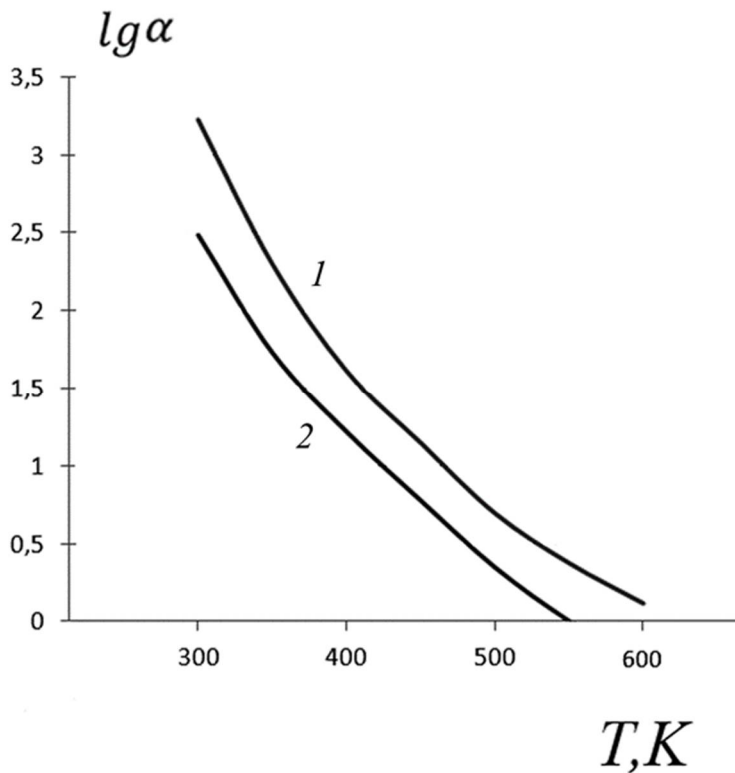


Fig. 3. Variation of α – coefficient relative to temperature in “Methane – air” flame for (II) and (V) steps: 1. $\epsilon = 1$; 2. $\epsilon = 0.01$

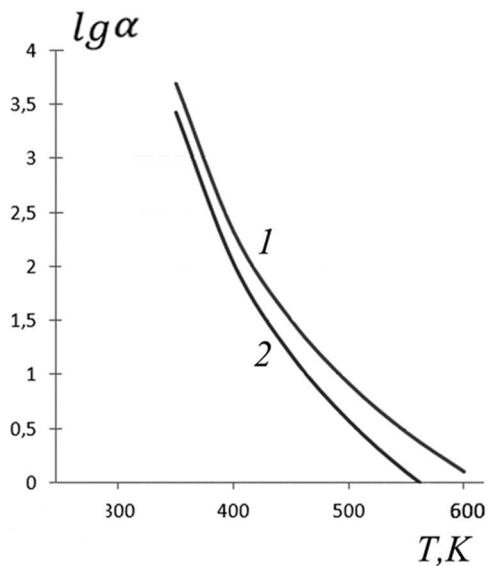


Fig. 4. Change of α – coefficient versus temperature in “Methane – air” flame for (III) and (V) steps:
1. $\epsilon = 1$; 2. $\epsilon = 0.01$

At higher temperature conditions the effectiveness of heterogeneous chemical inhibition of combustion is quite low. Presumably, such result indicates that the flame suppression by the fire-fighting powders is hardly to explain only by heterogeneous chemical factors. They must be added with effect of the thermal factor, i.e. cooling effect of the combustion zone by solid particles, as well as with homogeneous inhibition of combustion reaction.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Linteris G.T., Rumminger M.D., Babushok V.I. Catalytic inhibition of laminar flames by metal compounds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2008, v. 34, № 3, p. 288 -329.
2. Peters N. Combustion Theory (course of Lectures). *CEFRS Summer School*, June 28 – July2, 2010, Princeton, 285 p.
3. Анцупов Е.В. Оценка вклада в ингибирование пламени гомогенного и гетерогенного механизма. *Горение и Плазмохимия*, 2012, т. 10, № 4, с. 262 - 267.
4. Баратов А.Н., Молчадский И.С. Горение на пожаре. М., ВНИИПО, 2011, 503 с.
5. Krasnyansky M. Studies of fundamental physical-chemical mechanisms and processes of flame extinguishing by powder aerosols. *Fire and Materials*, 2008, v. 32, № 1, p. 27-47.
6. Voelkert J.C. Fire and fire extinguishment. Chicago, *National Association of Fire Equipment Distributors (NAFED)*, 2015, 28 p.
7. Gurchumelia L., Bezarashvili G., Chikhradze M., Chudakova O. Investigation of performance properties of novel composite fire-extinguishing powders based on mineral raw materials. *Computational Methods and Experiments in Materials Characterisation IV*, Southampton, UK, WIT-press, 2009, p. 337 – 343.
8. Ксандопуло Г.И., Дубинин В.В. Химия газофазного горения. М., Химия, 1987, 240 с.
9. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М., Наука, 1980, 478 с.
10. Денисов Е.Т., Азатян В.В. Ингибирование цепных реакций. Черногловка, РАН, 1997, 268 с.
11. Lazarovich A., Kalliadadis S., Merkin J., Scott S.K., Simon P.L. The propagation and inhibition of an exothermic branched-chain flame with an endothermic reaction and radical scavenging. *Journal of Engineering Mathematics*, 2004, v. 49. p. 41 – 55.
12. Гардинер У. Химия горения : пер. с англ. М., Мир, 1988, 464 с.
13. ბეზარაშვილი გ.ს. როლუ ფიზიკურ-ქიმიურ პროცესთა მათემატიკური მოდელირების ზოგიერთი ასპექტი: ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის სამეცნიერო ხარისხის მოსაპოვებლად წარმოდგენილი დისერტაცია. თბილისი, 2004, 286 გვ.
14. ბეზარაშვილი გ., ლორთქიფანიძე დ., ძოწენიძე ზ. წვის თეორიული საფუძვლები. თბილისი, თსუ გამომცემლობა, 1997, 348 გვ.
15. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей : пер. с англ. М., Изд-во ин. лит. , 1961, 930 с.

16. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1987, 502 с.

ალის ჰეტეროგენული ინჰიბირების საკითხისათვის

გიორგი ბეზარაშვილი, კახაბერ სულაბერიძე, დავით ფეტვიანი, ლალი ღურჭუმელია*, მანანა კეკელიძე
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი,

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი,

ფიზიკური და ანალიზური ქიმიის ინსტიტუტი

** რაფიელ აგლაძის სახელობის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი*

რეზიუმე

სადღეისოდ ითვლება, რომ არაორგანულ მარილთა ფხვნილების მსხვილი ნაწილაკებით (ნაწილაკთა დიამეტრი $d > 30$ მკმ) ლამინარულია ლისინჰიბირებისას განსაკუთრებული მნიშვნელობა ენიჭება ჰეტეროგენულ ქიმიურ ფაქტორს; კერძოდ, რეაქციის წამყვანი აქტიური ცენტრების - ატომებისა და რადიკალების ჰეტეროგენულ დაღუპვას მყარნაწილაკთა ზედაპირზე. სამწუხაროდ, დღემდე არ არსებობს ერთიანი და ნათელი წარმოდგენა იმის შესახებ, თუ ალის რომელ ტემპერატურულ უბანში ხორციელდება რეაქციის ეფექტური ინჰიბირება: დაბალტემპერატურულ, საშუალოთ უმაღლტემპერატურულ უბნებში. წარმოდგენილი ნაშრომის მიზანს შეადგენდა თეორიულ გაანგარიშებათა საფუძველზე გარკვეული სიცხადის შეტანა ამ საკითხის გარკვევაში. მოდელურ პროცესებად შერჩეული იქნა წყალბადისა და მეთანის წვის ჰეტეროგენული ინჰიბირება, რომელთა მაღალტემპერატურული დაჟანგვის კინეტიკური მექანიზმები სადღეისოდ კარგად არიან დადგენილნი. თეორიულ გაანგარიშებათა საფუძველზე გამოიკვია, რომ არაორგანული მარილების ფხვნილებით ლამინარული ალის გავრცელების ინჰიბირებისას რეაქციის აქტიურ ცენტრთა ჰეტეროგენულ დაღუპვას შეუძლია ეფექტური კონკურენცია გაუწიოს მნიშვნელოვან აირადფაზურ სტადიებს მხოლოდ გახურების ზონის შედარებით დაბალტემპერატურულ უბანში: $T < 600$ K. უფრო მაღალი ტემპერატურების პირობებში წვის რეაქციის ჰეტეროგენული ქიმიური ინჰიბირების ეფექტურობა საკმაოდ დაბალია.

სავარაუდოდ, ასეთი შედეგი მიუთითებს იმაზე, რომ ცეცხლმაქრი ფხვნილებით ალის გავრცელების ჩახშობა ძნელად აიხსნება მხოლოდ ჰეტეროგენული ქიმიური ფაქტორებით. მათ აუცილებლად უნდა დაემატოს ჰომოგენური ინჰიბირებისა და თერმული ფაქტორის მოქმედებაც, ე.ი. მყარი ნაწილაკებით წვის ზონის გაცივების ეფექტი და რეაქციის აირად ფაზური ინჰიბირება.

К ВОПРОСУ О ГЕТЕРОГЕННОМ ИНГИБИРОВАНИИ ПЛАМЕНИ

Г.С.Безарашвили, К.Т.Сулаберидзе, Д.И.Петвиашвили, Л.В.Гурчумелия*, М.Г.Кекенадзе

Тбилисский государственный университет им. И. Джавахишвили

Факультет точных и естественных наук, Институт физической и аналитической химии

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

РЕЗЮМЕ

На сегодняшний день принято считать, что при ингибировании ламинарного пламени крупными частицами порошков неорганических солей ($d > 30$ мкм) особое значение приобретает гетерогенный химический фактор; в частности, гетерогенная гибель ведущих активных центров реакции – атомов и радикалов на поверхности твердых частиц. К сожалению, до сих пор отсутствует единое представление о том, в какой температурной области осуществляется эффективное ингибирование реакции: в низкотемпературной, в средней или в высокотемпературной области пламени. Цель представленной работы заключается в том, чтобы внести некоторую ясность в этом вопросе на основе теоретических расчетов. В качестве модельных процессов были выбраны гетерогенное ингибирование горения водорода и метана. Результаты соответствующих вычислений показали, что при ингибировании распространения пламени твердыми частицами гетерогенная гибель ативных центров реакции горения может эффективно конкурировать с ведущими газофазными стадиями только в низкотемпературной области зоны прогрева пламени: $T < 600$ K. В условиях более высоких температур эффективность гетерогенного химического ингибирования реакции довольно низкая. Такой результат указывает на то, что подавление пламени огнетушащими порошками трудно объяснить только гетерогенными химическими факторами. Обязательно нужно учитывать действия термических и гомогенных химических факторов, т.е. эффект охлаждения и газофазное ингибирование реакции горения.

EXCITON FINE STRUCTURE IN LOW SYMMETRY QUANTUM DOTS

R.Djanelidze and E.Tsitsishvili

Institute for Cybernetics, Tbilisi Technical University, S. Euli 5,0186, Tbilisi, Georgia

The exciton ground state in a single semiconductor quantum dot (QD) with low symmetry is calculated within the Luttinger–Kohn and Bir–Pikus Hamiltonian theory. It is shown in an explicit form that an interplay of the electron–hole exchange interaction and the heavy hole–light hole coupling plays an essential role. It is revealed that the main impact on the exciton ground state is due to the confinement and strain anisotropy in a plane of a dot. For both the bright and dark exciton in this case, the mentioned combined effect leads to a dependence of the fine structure splitting and polarizations on the main anisotropy axis direction relative to the dot orientation. Some special cases are discussed on the basis of the obtained analytical expressions.

Keywords: Quantum dots, optical–related phenomena

I. INTRODUCTION

During the last two decades, self–assembled quantum dots (QDs), also known as artificial atoms, attract a great interest, in particular both for fundamental physics and for applied physics. One of the most prominent applications of QDs is as the entangled photon emitters, based on the biexciton cascade process [1, 2]. While ideally polarization entanglement proposals require a degeneracy of the intermediate exciton state [1], real self–assembled semiconductor QDs (grown along the [001] direction) don't meet this condition. A splitting of the two bright exciton states, known as the fine structure splitting (FSS), occurs even in cylindrically symmetric QDs as a consequence of the intrinsic atomistic asymmetry of the underlying lattice combined with the electron–hole exchange interaction [3]. For QDs with an elliptical base, excitonic fine structure is additionally produced by the long–range exchange interaction [4–6]. Besides, numerous experimental investigations of the neutral exciton emission in single self–assembled QDs show that the growth conditions significantly influence the polarization properties and the FSS of the bright exciton [7–14]. The observed results were attributed to a mixing of isospin states of heavy and light holes in the valence band. This effect, called usually as the valence band mixing (VBM), is typical already for bulk semiconductor crystals and for QDs can arise from anisotropic strains build up in a QD and a geometrical asymmetry as well. Although some theoretical background has been provided in the cited experimental references and in the recent paper [20] as well, detailed analytical description of the VBM impact on the exciton fine structure in QDs is still absent, to our knowledge. Theoretical researches in this field are devoted mainly to a change of the FSS under external perturbations [15–19]. The purpose of this paper is to understand how actually the VBM affects the exchange interaction and, respectively, changes qualitatively the FSS and polarization of the bright and dark excitons in a single QD with a reduced symmetry. Analytical calculations are performed for model QDs using the Luttinger–Kohn and Bir–Pikus theories. We believe that the obtained results are reasonable for flat (lens–shaped) QDs, where the atomistic symmetry doesn't cause any noticeable mixing of the orbital and Bloch characters for the electron and hole levels [3]. We find that the main VBM effect is due to the confinement and strain anisotropy in a plane of a QD and the orientation of the main (in–plane) anisotropy axis with respect to the dot direction is of a paramount importance. The obtained results are applicable to QDs under external stresses and then directly specify a dependence of the exciton properties on the stress direction.

II. THE MODEL

We consider eight exciton states confined in a self–assembled flat QD grown in the [001] (z) direction: four heavy–hole (hh) and four light–hole (lh) states associated with the projection of the total hole angular momentum $|J_z|=3/2$ and $|J_z|=1/2$, respectively. For ideal QDs, the Hamiltonian may be written as $H = H_{\text{QD}} + H_{\text{ex}}$, where $H_{\text{QD}} = \sum_n E_n |n\rangle\langle n|$ describes the exciton energies and H_{ex} accounts for the electron–hole exchange interaction. The energy $E_n = 0$ for all hh exciton states and $E_n = E_{\text{lh}}^{(0)}$ for all lh exciton states. For Stransky–Krastanov type dots, where strain is required in quantum dot formation, a major effect responsible for the heavy hole–light hole splitting is the biaxial in–plane compressive strain (known as the epitaxial strain), which lifts the heavy–hole band, so that $E_{\text{lh}}^{(0)} > 0$. Typical valence band splittings $E_{\text{lh}}^{(0)}$ found in quantum dot experiments are large, on the order of 10 meV, and the hole ground state is in first approximation treated as a purely heavy–hole state. For real QDs, the shape elongation and anisotropic distribution of the strain built

up in a dot can, however, enhance the light-hole admixture. Basing on the Luttinger-Kohn and Bir-Pikus (LKBP) theories [21, 22], the in-plane anisotropy of the confinement potential and strain leads to a mixing between the $J_z = \pm 3/2$ and $J_z = \mp 1/2$ hole states, whereas the anisotropy in the growth direction couples the $J_z = \pm 3/2$ and $J_z = \pm 1/2$ hole states, see Appendix A. Consequently, the eigenfunctions for the exciton ground state become a mixture between the pure hh and lh exciton states. The overall exciton spins are modified further by the short-range electron-hole exchange interaction H_{sre} , see Appendix B, which splits (mixes) the states with the different (the same) total angular momentum $M_z = J_z + s_z$, s_z is the electron spin. Having in mind the QDs with a nonspherical base, the $M_z = \pm 1$ states are coupled mainly by the long-range exchange interaction [4, 6], whereas the atomistic anisotropy leads to a splitting of the bright exciton states already in symmetrical QDs with C_{2v} symmetry [3, 24]. As a result, the true exciton ground state in real QDs becomes fully split into the four nondegenerate states.

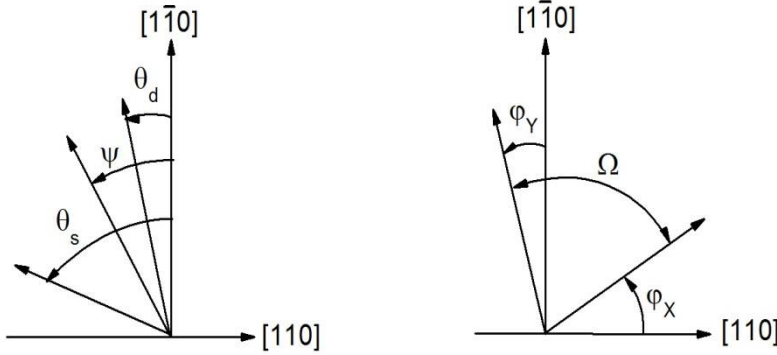


FIG. 1: Definition of the angles involved in the simulation. Left panel: The angle θ_d , θ_s , and ψ sets the dot orientation, the strain direction, and the main anisotropy axis, respectively. Right panel: ϕ_X and ϕ_Y are the tilt angles of the $|X\rangle$ and $|Y\rangle$ eigenstates, and Ω is the angle between these two states.

III. EXCITON FINE STRUCTURE AND OPTICAL ANISOTROPY

For the Hamiltonian (A6), the corresponding eigenvalue problem is solved exactly, according to Ref. [22]. The resulting eigenfunctions are the linear combinations of the $|J_z\rangle$ hole states and, consequently, the electron-hole pair functions become superpositions of the $|J_z, s_z\rangle$ basis exciton states. To avoid the long and bulky formulas, we consider below the VBM due to the in-plane anisotropy and the anisotropy in the z direction separately.

A. The in-plane anisotropy.

The bright exciton ground states. Simultaneous action of the off-diagonal R term in the LKBP Hamiltonian and the exchange interaction brings to the following linear combinations of the $|\Psi_1\rangle$ and $|\Psi_2\rangle$ pair states (see Eq.(A7)):

$$|X\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Psi_1\rangle - e^{2i\Phi_1} |\Psi_2\rangle], \quad (1)$$

$$|Y\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Psi_1\rangle + e^{2i\Phi_1} |\Psi_2\rangle]. \quad (2)$$

These true exciton states are split by the energy $\Delta_1 = |E_X - E_Y| = \sqrt{\chi_1^2 + \chi_2^2}$, with

$$\chi_1 = C_1^2 \Delta_h + C_2^2 \Delta_l \cos 4\alpha + \frac{4}{\sqrt{3}} C_1 C_2 \Delta_{sl} \cos 2\alpha, \quad (3)$$

$$\chi_2 = 2C_2 \sin 2\alpha (C_2 \Delta_l \cos 2\alpha + \frac{2}{\sqrt{3}} C_1 \Delta_{sl}), \quad (4)$$

$\alpha = \psi - \theta_d$ and Δ_h (Δ_l) denoting a splitting between the $|+1h\rangle$ and $|-1h\rangle$ ($|+1l\rangle$ and $|-1l\rangle$) bright states. As noted above, we believe that Δ_h (Δ_l) is nonzero even in a shaped-symmetric dot. Remember also that the angle ψ and θ_d determines the main anisotropy axis direction and the dot orientation relatively to the $[110]$ axis, respectively. The phase Φ_1 (defined relatively to the $[110]$ axis) obeys the equation

$$\tan(2\Phi_1) = \frac{\chi_1 \sin 2\theta_d + \chi_2 \cos 2\theta_d}{\chi_1 \cos 2\theta_d - \chi_2 \sin 2\theta_d}. \quad (5)$$

Note that the phase Φ_1 differs generally from the dot orientation θ_d and at fixed θ_d may change with ρ and α , in difference from the results reported in Ref.[12] where a combined effect of the VBM and electron-hole exchange interaction was neglected.

It is easy to check that the obtained $|X\rangle$ and $|Y\rangle$ eigenstates are linearly polarized in the dot plane but are generally nonorthogonal. The corresponding polarization directions are tilted with respect to the crystallographic axes $[110]$ and $[\bar{1}\bar{1}0]$, respectively, at the angles (see the right panel in Fig. 1)

$$\tan \varphi_{X,Y} = \frac{\sqrt{3}C_1 \sin \Phi_1 \pm C_2 \sin(2\psi - \Phi_1)}{\sqrt{3}C_1 \cos \Phi_1 \pm C_2 \cos(2\psi - \Phi_1)}. \quad (6)$$

The angle Ω between them is expressed by

$$\cos \Omega = \frac{2\sqrt{3}C_2C_1 \sin 2(\psi - \Phi_1)}{\sqrt{9C_1^4 - 6C_2^2C_1^2 \cos 4(\psi - \Phi_1) + C_2^4}}. \quad (7)$$

According to the above presented results, we can conclude that the FSS and polarization directions of the bright exciton significantly depend on the dot symmetry. Ideal QDs with D_{2d} symmetry show no in-plane anisotropy, that is $\rho = 0$ and $\Delta_h = \Delta_l = 0$, so that the $|X\rangle$ and $|Y\rangle$ exciton states are degenerate and orthogonally polarized along the $[110]$ and $[\bar{1}\bar{1}0]$ directions.

For QDs with C_{2v} symmetry, the dot and strain directions have to coincide with the high symmetry direction, that is $\theta_s = \theta_d = 0$ and therefore the mixing phase $\psi = 0$. Consequently, the states are linearly polarized along the $[110]$ and $[\bar{1}\bar{1}0]$ orthogonal directions and split generally by the energy $\Delta_1 = |\Delta + (4\sqrt{3})C_1C_2\Delta_{st}|$, where $\Delta = C_1^2\Delta_h + C_2^2\Delta_l$. The magnitude of the FSS changing from dot to dot can be tuned to zero in dots with $\Delta < 0$, as has been observed experimentally for elongated InAs/GaAs self-assembled QDs in Ref.[13].

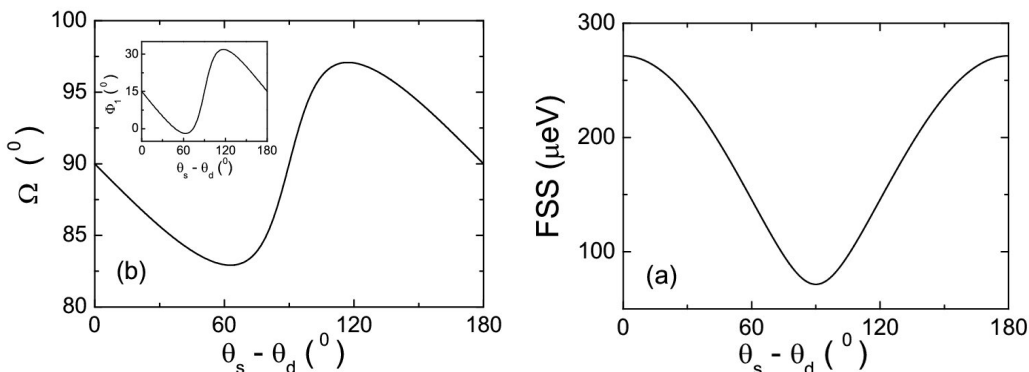


FIG. 2: (a) The FSS of the bright exciton, (b) the angle between the $|X\rangle$ and $|Y\rangle$ eigenstates, and (insert) the phase Φ_1 as a function of the angle $\theta_s - \theta_d$ between the strain direction and the dot-shape direction.

For real QDs with C_1 symmetry, the strain and dot directions are generally different and the FSS and polarizations exhibit a rather intricate dependence on θ_s and θ_d . In a particular case of weakly asymmetric

QDs, $\rho \approx \rho_s$ and $\psi \approx \theta_s$, the FSS Δ_1 and the angle Ω become very sensitive to the angle θ_s - θ_d between the strain direction and the dot direction. Both Δ_1 and Ω are modulated by a sinusoidal perturbation with an amplitude defined by the exchange interaction and the light hole probability, respectively. At specific values θ_s - $\theta_d = n\pi/2$ (n is an integer), the FSS has extreme values and the angle $\Omega = 90^\circ$. For the fixed direction of the strain $\theta_s = 15^\circ$, it is illustrated in Fig. 2(a) and Fig. 2(b). To evaluate numerically the FSS Δ_1 and the angle Ω from Eq.(3), Eq.(4), and Eq.(7), respectively, we also take $\Delta_{st} = 400\mu\text{eV}$, $\Delta_h = \Delta_l = 100\mu\text{eV}$, $\rho_s E_{lh}^{(0)} = 0.2$. The insert shows a change of the phase Φ_1 with θ_s - θ_d . We observe that the FSS (varying between $72\mu\text{eV}$ and $272\mu\text{eV}$ for the above chosen parameters) is minimal when the dot and the strain directions are perpendicular and maximal when they are parallel. The angle Ω varies around the angle in 90° (with a deviation of $\pm 7^\circ$) being acute at θ_s - $\theta_d < \pi/2$ and blunt at θ_s - $\theta_d > \pi/2$. A rather sharp switching from the one mode ($\Omega < 90^\circ$) to the other ($\Omega > 90^\circ$) occurs at a critical point θ_s - $\theta_d = 90^\circ$, where the FSS has the lower bound. Note that similar features were reported in Refs.[9, 11], where numerical calculations for the splitting of the emission lines and their direction of polarization in individual self-assembled CdTe/ZnTe QDs and InAlAs QDs, respectively, are presented.

The dark exciton ground states. The two dark exciton states are read as

$$|Z_{1,2}\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{2}}[|\Psi_3\rangle \mp e^{2i\Phi_2}|\Psi_4\rangle]. \quad (8)$$

The phase Φ_2 is defined relatively to the [110] axis and obeys the equation

$$\tan(2\Phi_2) = \frac{\chi_3 \sin 4\psi}{\chi_4 + \chi_3 \cos 4\psi}, \quad (9)$$

where $\chi_3 = (4/3) C_2^2 \Delta_{st}$ and $\chi_4 = \delta_2 C_1^2$. The FS splitting is given by

$$\Delta_2 = |E_{Z_1} - E_{Z_2}| = \sqrt{\chi_4^2 + \chi_3^2 + 2\chi_3\chi_4 \cos 4\psi}. \quad (10)$$

The most important effect of the hh–lh mixing is that both the $|Z_1\rangle$ and $|Z_2\rangle$ eigenstates are now weakly allowed and contribute to the optical transitions parallel to the growth (z) direction. It is easy to check that the corresponding emission probability $|\mathcal{M}_{1,2}|^2 \propto C_2^2 [1 \mp \cos 2(\Phi_2 - 2\psi)]$. For the QDs with C_{2v} symmetry, the main anisotropy axis direction $\psi = 0$ and the FSS gets the upper bound $\Delta_2 = \chi_4 + \chi_3$ at $\delta_2 > 0$. In this case only the upper $|Z_2\rangle$ state makes a weak contribution in the optical transitions.

B. Anisotropy along the growth axis.

The off-diagonal S term in the hole Hamiltonian (see Eq.(A6)), which is due to the anisotropic confinement along the growth (z) axis of a QD and/or the off-plane shear strains, leads to a mixing between the $J_z = +3/2$ ($-3/2$) and $J_z = +1/2$ ($-1/2$) states and, as a consequence, between the (electron–hole) pair states with the values of the total angular momentum M_z differing on unit, see Eq.(A10) and Eq.(A11). Hence generally the all four electron–hole pair states $|\Psi_i\rangle$ are mixed by the exchange interaction. For self-assembled QDs, however, the exchange energy Δ_{st} strongly exceeds, as a rule, the splitting of both the bright and dark exciton states Δ_h and δ_2 , respectively, so that the bright–dark coupling can be negligible. The resulting exciton ground state then reduces to a form

$$|B_{1,2}\rangle \propto \frac{A_1}{\sqrt{2}}[|+1h\rangle \mp e^{\pm 2i\varphi_b}|-1h\rangle] - \frac{A_2}{\sqrt{2}}e^{2i\omega}[|0^-\rangle \mp e^{2i(\varphi_b - 2\omega)}|0^+\rangle], \quad (11)$$

$$|D_{1,2}\rangle \propto \frac{A_1}{\sqrt{2}}[|+2h\rangle \mp e^{\pm 2i\varphi_d}|-2h\rangle] - \frac{A_2}{\sqrt{2}}e^{2i\omega}[|+1l\rangle \mp e^{2i(\varphi_d - 2\omega)}|-1l\rangle], \quad (12)$$

where the phases φ_b and φ_d depend on the anisotropy parameters σ and ω [25]. For the obtained states, the FS splitting $\Delta_B = |E_{B1} - E_{B2}|$ and $\Delta_D = |E_{D1} - E_{D2}|$ are given by

$$\Delta_B = \sqrt{A_1^4 \Delta_h^2 + \frac{16}{9} A_2^4 \Delta_{st}^2 + \frac{8}{3} A_1^2 A_2^2 \Delta_h \Delta_{st} \cos 2(2\omega - \theta_d)}, \quad (13)$$

$$\Delta_D = \sqrt{A_1^4 \delta_2^2 + A_2^4 \Delta_l^2 + 4A_1^2 A_2^2 \Delta_l \delta_2 \cos 4\omega}. \quad (14)$$

We observe that in the presence of σ the heavy hole–light hole mixing, similarly to the previous (in–plane anisotropy) case, leads to an appearance of the off–plane polarized component. (Remember that the $M_z=0$ states are optically active with the transversal polarization.) As for the in–plane polarized states, it seems that here the existence of ρ has more significant influence than σ . Indeed, as discussed above, in the presence of ρ the relevant $|X\rangle$ and $|Y\rangle$ states are generally nonorthogonal, see Eq.(7). However, from the expressions (11) and (12) definitely follows that the $B_1(D_1)$ and $B_2(D_2)$ states are orthogonally polarized in the lateral plane. The polarization directions are tilted with respect to the $[110]$ axis at the angles φ_b (φ_d) and $\varphi_b + \pi/2$ ($\varphi_d + \pi/2$), respectively. It means that in the presence of σ the orthogonality of the bright states is preserved, as for ideal QDs. Similar conclusion is valid for the FSS of the bright states. Comparing the relevant splitting Δ_1 and Δ_B (see Eqs.(3), (4), and Eq.(13)), one can see that the VBM–exchange interplay is more effective in the presence of ρ as in the presence of σ . Indeed, $\Delta_1 \approx \Delta_h + O(\rho)$ at $\rho \ll 1$ ($\sigma = 0$), but $\Delta_B \approx \Delta_h + O(\sigma^2)$ at $\sigma \ll 1$ ($\rho = 0$). Hence we can conclude that the main VBM effect in QDs is due to the confinement and strain anisotropy in the plane of a dot.

IV. IMPACT OF EXTERNAL STRESSES

The obtained results can be extended to the case of QDs under the external stresses. For the in–plane stress, the stress–induced hh–lh mixing is introduced through the strain tensor components $\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} = p(S_{11} - S_{12})\cos 2\theta_x$ and $\varepsilon_{xy} = (1/4) pS_{44}\sin 2\theta_x$, where p is the stress magnitude, S_{ij} are the components of the compliance tensor, and the angle θ_x sets the external stress direction with respect to the $[100]$ axis. The corresponding term in the Bir–Pikus Hamiltonian $R(p) = \rho_p e^{-2i\theta_p}$, where the angle θ_p determines the (stress–induced) strain direction with respect to the $[110]$ axis. For the tensile (compressive) stress along the $[110]$, $[1\bar{1}0]$, or $[100]$ axis, $\theta_p = \frac{\pi}{2}$ (0), $\theta_p = 0$ ($\frac{\pi}{2}$), or $\theta_p = \frac{\pi}{4}$ ($-\frac{\pi}{4}$). (We take the compressive stress as negative.) Besides, the hh–lh splitting introduced in Eq.(A9) is replaced by $E_{lh}(p) = E_{lh}^{(0)} + b(S_{11} - S_{12})p$ [22]. From the results presented in the Section III A we immediately conclude that the properties of the exciton ground state in QDs under uniaxial stress depend on the dot symmetry and the stress direction which now operates the hole mixing parameter ψ , in agreement with previous results based on the symmetry consideration [26]. Assuming that the dot parameters (Δ_h , Δ_l , and Δ_{st}) are not change under the external stress, a combined effect of the stress–induced hole mixing and the exchange interaction will be here of a paramount importance. Below we concentrate on a behavior of the bright exciton. For symmetrical QDs with C_{2v} symmetry, which show no built–in anisotropic strains, the angle $\alpha = \psi = \theta_p$ and therefore the FSS is governed directly by the external stress direction θ_p . For the stress oriented along the high symmetry axis, the FSS, according to the Eq.(3) and Eq.(4), is given by

$$\Delta_1 = |\Delta \mp (4/\sqrt{3})C_1 C_2 \Delta_{st}|, \quad (15)$$

where a “–” or “+” sign refers to the tensile (compressive) stress or compressive (tensile) stress along the $[110]$ ($[1\bar{1}0]$) direction, $C_1(C_2)$ is given by Eq.(A9) with $\rho = \rho_p = dS_{44}p/4$, and $E_{lh}^{(0)} \rightarrow E_{lh}(p)$, as noted above. Believing that $\Delta > 0$, from the result (15) follows that the FSS can be tuned to zero by means of the tensile stress along the $[110]$ direction or the compressive stress along the $[1\bar{1}0]$ direction. If the external stress orientation deviates from the high symmetry axis, the original symmetry is violated and the FSS cannot be tuned to zero. For example, for the stress along the $[100]$ axis, $\alpha = \pm\pi/4$ and Δ_1 reduces to

$$\Delta_1 = \sqrt{(C_1^2 \Delta_h - C_2^2 \Delta_l)^2 + \frac{16}{3} C_1^2 C_2^2 \Delta_{st}^2}, \quad (16)$$

where $C_1(C_2)$ are given by Eq.(A9) with $E_{lh}^{(0)} \rightarrow E_{lh}(p)$ and $\rho_p = \sqrt{3}b(S_{11} - S_{12})p/2$. One can proof that the elongated QDs with C_{2v} symmetry ($\theta_d = 0$) will show similar features. For QDs with C_1 symmetry, no crossing of the bright exciton levels is possible at all, since now the orientation of the main anisotropy axis

and, consequently, the stress-dependent angle α in Eqs.(3) - (4) will depart from the [110] ([110]) direction. To illustrate, the FSS versus p along the [110], [110], and [100] axes given by Eqs.(15) - (16), respectively, is presented in Fig. 3. Calculations are performed with a set of typical parameters $b = -2$ eV, $d = -5$ eV, $S_{11} = 1.17 \times 10^{-12}$ cm²/dyn, $S_{12} = -0.37 \times 10^{-12}$ cm²/dyn, $S_{44} = 1.7 \times 10^{-12}$ cm²/dyn [27]. For other parameters we take $E_{th}^{(0)} = 20$ meV, $\Delta_h = \Delta_l = 10\mu\text{eV}$, and $\Delta_{st} = 100\mu\text{eV}$. The obtained results are in a qualitative accordance with those based on the atomistic pseudopotential calculations for pure InAs/GaAs QDs previously reported in Refs.[15, 26]. We observe in Fig. 3 that for the stress along the [110] and [110] directions, the FSS behaves almost symmetrically. Besides, for the considered stress region, the splitting shows a linear dependence on the stress magnitude because $\Delta_{st} \gg \Delta_h, \Delta_l$. Using the linear approximation, the zero value of Δ_l is reached at the critical stress

$$|p_{110}| \approx \frac{\Delta_h}{\Delta_{st}} \frac{\sqrt{3}E_{th}^{(0)}}{dS_{44}},$$

which may be different largely from QD to QD belonging to the self-assembled QDs structure. For the stress along the [100] axis, the FSS has its lower bound $\Delta_l = \Delta_h$ at $p = 0$.

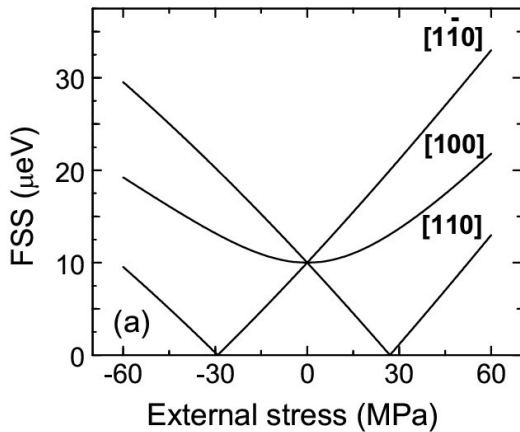


FIG. 3: The FSS of the bright exciton as a function of the uniaxial stress along the [110], [100], and [110] crystallographic directions.

According to the above presented results, the polarization directions of the bright exciton states also depend on the external stress magnitude and orientation, in agreement with the previous results reported in the literature [15, 18, 19, 26, 28]. For pure QDs with C_{2v} symmetry under the stress along the [110] ([110]) direction, the polarization direction is still set by the high symmetry axis. There are here, however, some peculiarities. When the stress is oriented, for example, along the [110] direction, the $|X\rangle(|Y\rangle)$ state of the bright exciton is polarized along the [110] ([110]) axis below p_{110} , but the polarization jumps to the [110] ([110]) direction after p_{110} . Indeed, $\chi_2 = 0$ and χ_1 changes a sign at $p = p_{110}$ at $\theta_d = 0$. Consequently, the phase Φ_1 , which obeys the equation $\tan(2\Phi_1) = \chi_2/\chi_1$ at $\theta_d = 0$, see Eq.(5), differs by 90° below and after p_{110} . Similarly one can check that at enough large values of $|p|$ (when the approximation $C_1C_2\Delta_{st} > \Delta$ is valid) the stress along the [100] direction induces a rotation of the polarization directions from their conventional directions along the [110] and [110] axes in unstrained QDs towards the [100] and [010] directions.

V.SUMMARY

In summary, the exciton ground state in real quantum dots is considerably affected by a mixing of the isospin states in the valence band. In particular, the heavy hole-light hole coupling triggers a considerable contribution in the off-plane polarized optical transitions. It turns out that the main influence on the exciton properties is due to the confinement and strain anisotropy in a plane of a dot. For the in-plane anisotropy case, the fine structure splitting of the exciton ground state and the polarization of emitted photons as well are significantly dependent on the orientation of the main anisotropy axis in the plane of a dot with respect to the dot orientation. Such result is a consequence of an interplay of two leading mechanisms which modify the spin states in a quantum dot. The first mechanism is given by the Luttinger-Kohn-Bir-Pikus terms which couple the hole spin states and are due to the shape asymmetry and anisotropic strains built up

in a quantum dot and/or arising out of the external stresses. The second mechanism is due to the hole–electron exchange interaction which modify the overall exciton spins. The presented here analytical results, covering some special cases discussed previously in the literature, allow to predict qualitatively the excitonic properties in quantum dots with different features. In particular, a behavior of the FS splitting in dots affected by external stresses falls under consideration.

Appendix A: 4 × 4 Luttinger–Kohn–Bir–Pikus model.

According to the Luttinger–Kohn and Bir–Pikus (LKBP) theories, the valence band is described by a (4 × 4) matrix in the $|3/2, J_z\rangle$ Bloch functions basis [21, 22]. In the $\{|3/2, 3/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle, |3/2, 1/2\rangle, |3/2, -3/2\rangle\}$ basis this matrix reads as

$$\begin{pmatrix} P+Q & R & -\sqrt{2}S & 0 \\ R^\dagger & P-Q & 0 & \sqrt{2}S \\ -\sqrt{2}S^\dagger & 0 & P-Q & R \\ 0 & \sqrt{2}S^\dagger & R^\dagger & P+Q \end{pmatrix}. \quad (\text{A1})$$

The matrix elements are given as a sum of kinetic and strain terms:

$$P = \tilde{\gamma}_1 k^2 + a\varepsilon, \quad (\text{A2})$$

$$Q = \tilde{\gamma}_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (\text{A3})$$

$$S = \sqrt{6}\tilde{\gamma}_3(k_x - ik_y)k_z + \frac{d}{\sqrt{2}}(\varepsilon_{zx} - i\varepsilon_{yz}) \quad (\text{A4})$$

$$R = -\sqrt{3}[\tilde{\gamma}_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\tilde{\gamma}_3k_xk_y] + \frac{\sqrt{3}}{2}b[\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}] - id\varepsilon_{xy}, \quad (\text{A5})$$

where $\vec{k} = \{k_x, k_y\}$ ($x \parallel [100], y \parallel [010]$) is the in–plane momentum operator, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ are the strain tensor components with $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ and $\varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$, $\tilde{\gamma}_i = \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_i$ with γ_i the Luttinger constants (in what follows we take $\gamma_2 = \gamma_3$), and a, b and d are the deformation potential constants. For self–assembled QDs, the hh–lh degeneracy lift can be due to biaxial strains and/or different confinement in the growth direction and in a plane of a dot, see Eq.(A3). Off–diagonal R (S) term describes the hh–lh mixing due to the confinement anisotropy and anisotropic relaxation of strains in the plane (along the growth z axis) of a dot. Using the heavy–hole band as the origin of the energies and taking an average over the hole envelope functions (we take for simplicity the same envelopes for the heavy and light holes) $\langle R \rangle = \rho e^{2i\psi}$ and $\langle S \rangle = \sigma e^{2i\omega}$, the dot Hamiltonian takes a form

$$\begin{pmatrix} 0 & \rho e^{-2i\psi} & -\sqrt{2}\sigma e^{-2i\omega} & 0 \\ \rho e^{2i\psi} & -E_{lh}^{(0)} & 0 & \sqrt{2}\sigma e^{-2i\omega} \\ -\sqrt{2}\sigma e^{2i\omega} & 0 & -E_{lh}^{(0)} & \rho e^{-2i\psi} \\ 0 & \sqrt{2}\sigma e^{2i\omega} & \rho e^{2i\psi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A6})$$

As noted above, the case of the in–plane anisotropy is described by the R term, see Eq.(A5), which leads to a mixing between the $J_z = +3/2(-3/2)$ and $J_z = -1/2(+1/2)$ hole states. Taking the amplitude $\sigma = 0$, the resulting eigenfunctions for the electron–hole pair states (the exciton ground state) can be written as

$$|\Psi_{1,2}\rangle \propto C_1|\pm 1h\rangle - C_2e^{\pm 2i\psi}|\mp 1l\rangle, \quad (\text{A7})$$

$$|\Psi_{3,4}\rangle \propto C_1|\pm 2h\rangle - C_2e^{\pm 2i\psi}|0^{(\pm)}\rangle, \quad (\text{A8})$$

and the corresponding energy is $E_0 = \frac{1}{2} [E_{lh}^{(0)} \pm \sqrt{(E_{lh}^{(0)})^2 + 4\rho^2}]$. The phenomenological parameters ρ and ψ determine the hole coupling strength (amplitude) and the main anisotropy axis orientation in the QD plane with respect to the [110] crystallographic axis, respectively. The states involved in Eqs.(A7) - (A8) are labeled by a number denoting the projection of the total angular momentum $M_z = J_z + s_z$ and a letter h or l, denoting hh and lh exciton states, respectively. For the $M_z = 0$, a "+" or "-" sign denoting electron spin up or down is appended to distinguish between the two lh exciton states. Remember that the $|M_z| = 1$ and $M_z = 0$ states are optically active (bright excitons) with the lateral and transversal polarization, respectively. States with $|M_z| = 2$ are optically inactive (dark excitons). The probabilities for the exciton to be hh and lh exciton are given by

$$C_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{E_{lh}^{(0)}}{\sqrt{(E_{lh}^{(0)})^2 + 4\rho^2}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (A9)$$

respectively. Note that generally the parameters ρ and ψ depend on the mutual orientation of the dot elongation axis θ_d and the strain direction θ_s , see the left panel in Fig. 1. Taking $\langle R \rangle = \rho_d e^{-2i\theta_d} + \rho_s e^{-2i\theta_s}$, it turns out that $\rho = [\rho_d^2 + \rho_s^2 + 2\rho_d\rho_s \cos 2(\theta_d - \theta_s)]^{1/2}$ and $\tan(2\psi) = [\rho_d \sin 2\theta_d + \rho_s \sin 2\theta_s] / [\rho_d \cos 2\theta_d + \rho_s \cos 2\theta_s]^{-1}$. Similarly, keeping only the σ term in the above Hamiltonian, the resulting pair states can be written as

$$|\Psi'_{1,2}\rangle \propto A_1 |\pm 1h\rangle - A_2 e^{\pm 2i\omega} |0(\mp)\rangle, \quad (A10)$$

$$|\Psi'_{3,4}\rangle \propto A_1 |\pm 2h\rangle - A_2 e^{\pm 2i\omega} |\pm 1l\rangle, \quad (A11)$$

where the weights $A_{1,2}$ are given by the expression (A9) with replacement $\rho \rightarrow \sqrt{2}\sigma$.

Appendix B: Short-range exchange Interaction

The fine structure of the exciton ground state in QDs is governed mostly by the short-range exchange interaction, which can be presented as [4, 23]

$$H_{src} = - \sum_{i=x,y,z} [a_i \sigma_i \otimes J_i + b_i \sigma_i \otimes J_i^3]. \quad (B1)$$

Here σ_i are the spin $\frac{1}{2}$ matrices, a_i and b_i are the spin-spin coupling constants, and the cubic (second) term in Eq.(B1) is believed to be small. In the (considered here) isotropic approximation, where $a_i = a$ and $b_i = b$, the exchange Hamiltonian matrix in the space spanned by the $|+2h\rangle, |-2h\rangle, |+1h\rangle, |-1h\rangle, |+1l\rangle, |-1l\rangle, |0^+\rangle, |0^-\rangle$ states has a form

$$H_{src} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta_{st}}{2} & \frac{\delta_2}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\delta_2}{2} & -\frac{\Delta_{st}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta_{st}}{2} & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta_{st}}{2} & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\Delta_{st}}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta_{st}}{6} & \frac{2\Delta_{st}}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2\Delta_{st}}{3} & \frac{\Delta_{st}}{6} \end{pmatrix}. \quad (B2)$$

As follows from the above matrix representation, the linear (first) term in Eq.(B1) leads to a splitting $\Delta_{st} = 3a/2$ between the bright and dark exciton states, whereas the dark states become hybridized by the

cubic (second) term and, consequently, split by the energy $\delta_2 = 3b/2$. Besides, there is a coupling between the bright states of the hh exciton and the lh exciton with the same angular momentum $M_z = +1$ and $M_z = -1$ as well. It means, according to the results (A10) and (A11), that for dots showing the anisotropy along the growth axis, the exchange interaction mixes generally the all four electron-hole pair states. For the in-plane anisotropy case, such a complication is absent and the exciton Hamiltonian reduces exactly to the two independent submatrices describing the bright and dark doublets separately.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. O. Benson, C. Santori, M. Pelton, and Y. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. 84, 2513 (2000).
2. R.M. Stevenson, R. J. Young, P. Atkinson, K. Cooper, D. A. Ritchie, and A. J. Shields, Nature 439, 179 (2006).
3. Gabriel Bester, Selvakumar Nair, and Alex Zunger, Phys. Rev. B 67, 161306(R) (2003).
4. M. Bayer, G. Ortner, O. Stern, A. Kuther, A. A. Gorbunov, A. Forchel, P. Hawrylak, S. Fafard, K. Hinzer, T. L. Reinecke, S. N. Walck, J. P. Reithmaier, F. Klopff, and F. Schäfer, Phys. Rev. B 65, 195315 (2002).
5. T. Takagahara, Phys. Rev. B 62, 16840 (2000).
6. E.L. Ivchenko and G.E. Pikus, Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena, Springer-Verlag, Berlin, 1995; Optical spectroscopy of Semiconductor Nanostructures, Alpha Science International, Harrow, UK, 2005.
7. T. Belhadj, T. Amand, A. Kunold, C.-M. Simon, T. Kuroda, M. Abbarchi, T. Mano, K. Sakoda, S. Kunz, and X. Marie, Appl. Phys. Lett. 97, 051111 (2010).
8. I. Favero, G. Cassabois, C. Voisin, C. Delalande, Ph. Roussignol, R. Ferreira, C. Couteau, P.J. Poizat, and J.M. Gerard, Phys. Rev. B 71, 233304 (2005).
9. Y. Léger, L. Besombes, L. Maingault, and H. Mariette, Phys. Rev. B 76, 045331 (2007).
10. D.N. Krizhanovskii, A. Ebbens, A.I. Tartakovskii, F. Pulizzi, T. Wright, M.S. Skolnick, and M. Hopkinson, Phys. Rev. B 72, 161312(R) (2005).
11. S. Ohno, S. Adachi, R. Kaji, S. Muto, and H. Sasakura, Appl. Phys. Lett. 98, 161912 (2011).
12. C. Tonin, R. Hostein, V. Voliotis, R. Grousson, A. Lemaitre, and A. Martinez, Phys. Rev. B 85, 155303 (2012).
13. Chia-Hsien Lin, Wen-Ting You, Hsiang-Yu Chou, Shun-Jen Cheng, Sheng-Di Lin, and Wen-Hao Chang, Phys. Rev. B 83, 075317 (2011).
14. J. D. Plumhof, V. Křápek, L. Wang, A. Schliwa, D. Bimberg, A. Rastelli, and O. G. Schmidt, Phys. Rev. B 81, 121309(R) (2010).
15. Ming Gong, Weiwei Zhang, Guang-Can Guo, and Lixin He, Phys. Rev. Lett. 106, 2227401 (2011).
16. J. Wang, M. Gong, G.-C. Guo, and L. He, Appl. Phys. Lett. 101, 063114 (2012).
17. R. Trotta, E. Zallo, C. Ortix, P. Atkinson, J. D. Plumhof, . van den Brink, A. Rastelli, and O.G. Schmidt, Phys. Rev. Lett. 109, 147401 (2012).
18. J. D. Plumhof, R. Trotta, V. Křápek, E. Zallo, P. Atkinson, S. Kumar, A. Rastelli, and O. G. Schmidt, Phys. Rev. B 87, 075311 (2013).
19. Jianping Wang, Guang-Can Guo, and Lixin He, J. Phys.: Cond. Matter, 96, 475301 (2014).
20. E. Tsitsishvili, Physica E, 87, 161 (2017).
21. J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1995).
22. G. L. Bir and G. E. Pikus, Sov. Phys. Sol. State 3, 2221 (1962); Symmetry and Deformation Effects in Semiconductors, New York, Wiley (1974).
23. H. W. van Kesteren, E. C. Cosman, W. A. J. A. van der Poel and C. T. Foxon, Phys. Rev. B 41, 5283 (1990).
24. Such atomistic effects are missed by continuum models and below we will enter the "intrinsic" splitting of the bright doublet manually.

25. The phase φ_b obeys the equation $\tan(2\varphi_b) = (3A_1^2\Delta_h\sin 2\theta_d + 4A_2^2\Delta_{st}\sin 4\omega)(3A_1^2\Delta_h\cos 2\theta_d + 4A_2^2\Delta_{st}\cos 4\omega)^{-1}$. The phase φ_d obeys the equation $\tan(2\varphi_d) = 2A_2^2\Delta_{st}\sin 4\omega(A_1^2\delta_2 + 2A_2^2\Delta_{st}\sin 4\omega)^{-1}$.
26. R. Singh and G. Bester, Phys. Rev. Lett. 104, 196803 (2010).
27. O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss, Landolt-Börnstein (Eds.), Semiconductors: Physics of Group IV Elements and III-V Compounds, New Series, Group III, Vol. 17, Pts A and B, Springer-Verlag, Berlin, 1982.
28. J. D. Plumhof, V. Křápek, F. Ding, K. D. Jöns, R. Hafenbrak, P. Herklotz, K. Dörr, P. Michler, A. Rastelli, and O. G. Schmidt, Phys. Rev. B 83, 121302(R) (2011).

ექსიტონის ფაქიზი სტრუქტურა დაბალი სიმეტრიის მქონე კვანტურ წერტილებში

რ.ჯანელიძე, ე.ციციშვილი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, ვლადიმერ ჭავჭავანიძის სახელობის კიბერნეტიკის ინსტიტუტი

რეზიუმე

ლატინჯერ-კონის და ბირ-პიკუსის თეორიის ჩარჩოებში გამოთვლილია ექსიტონის ძირითადი მდგომარეობა დაბალი სიმეტრიის მქონე ერთეული ნახევარგამტარულ კვანტურ წერტილში. ცხადად ნაჩვენებია ელექტრონ-ხველური გაცვლითი ურთიერთქმედებისა და მძიმე და მსუბუქი ხვრელების შერევის ერთობლივი ქმედების მნიშვნელოვანი როლი. ეს კომბინირებული ეფექტი დამოკიდებულია ანიზოტროპიის ღერძის მიმართულებაზე კვანტური წერტილის ორიენტაციის მიმართ. აღმოჩენილია, რომ ექსიტონის ძირითად მდგომარეობაზე უდიდესი ზემოქმედება დაკავშირებულია ანიზოტროპიასთან კვანტური წერტილის სიბრყეში. მიღებული ანალიტიკური შედეგები განხილულია ზოგიერთი სპეციალური შემთხვევისათვის.

ТОНКАЯ СТРУКТУРА ЭКСИТОНА В НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Р.Джанелидзе и Е.Цицишвили

Грузинский технический университет, Институт кибернетики им. В.В. Чавчанидзе

РЕЗЮМЕ

В рамках теории Латтинжера – Кона и Бира – Пикуса рассчитано основное состояние экситона в одиночной полупроводниковой квантовой точке с низкой симметрией. Показано в явном виде, что совместное действие электрон – дырочного обменного взаимодействия и смешивания тяжелой и легкой дырки играет существенную роль. Этот комбинированный эффект приводит к зависимости тонкой структуры экситонных уровней и поляризации экситонных состояний от направления оси анизотропии относительно ориентации квантовой точки. Обнаружено, что основное воздействие на основное состояние экситона связано с анизотропией в плоскости квантовой точки. Полученные аналитические результаты обсуждены для некоторых специальных случаев.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАПРЯЖЕННЫХ НАНОСЛОЕВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $A^{IV}B^{VI}$ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОДЛОЖКАХ

А.М.Пашаев¹, О.И.Даварашвили², М.И.Енукашвили², З.Г.Ахвледиани^{2,3}, Л.П.Бычкова²,
Р.Г.Гуляев², М.А.Дзагания^{2,4}, В.П.Зломанов⁵

¹ Национальная Академия Авиации Азербайджана, Баку

² Тбилисский Государственный Университет им.Ив.Джавахишвили

³ Институт Физики им.Э.Андроникашвили, Тбилиси

⁴ Институт Физической и Органической химии им.П.Меликишвили, Тбилиси

⁵ Московский Государственный Университет им.М.В.Ломоносова

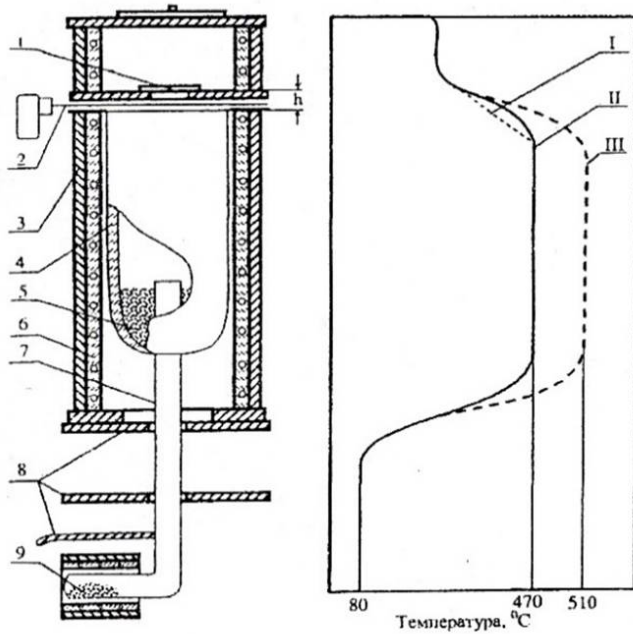
Известно, что в нанослоях полупроводников обнаружены изменения в энергетическом спектре носителей заряда, обусловленные квантовыми эффектами. Но значительно большие колебания в энергетическом спектре наблюдаются при анизотропной деформации полупроводниковых нанослоев – при незначительном изменении расстояния между составляющими их атомами существенно преобразуются тепловые, оптические, механические свойства. Технология создания деформированных, напряженных нанослоев основана на гетероэпитаксии за счет различия в параметрах решетки. На примере полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ показано, что, например, ширина запрещенной зоны при деформациях $\sim 0,01$ возрастает \sim на 50% от исходного значения. Поэтому весьма важно получать совершенные напряженные нанослои с управляемым тангенциальным параметром решетки (определяющего деформацию в слоях) при изменении их толщины. Представлены результаты по разработке технологии получения нанослоев с регулируемым уровнем напряжений при изменении их толщин, а также влияние субструктуры слоев на достижение максимальных деформаций. Обсуждаются перспективные исследования напряженных нанослоев для реализации низкоммерных структур (двумерных и одномерных) и направления ведущихся инновационных прикладных исследований с использованием напряженных нанослоев.

Исследования в материаловедении существенно расширили представление о формировании фундаментальных свойств материалов – оказалось, что они зависят не только от их состава (химической формулы соединений или твердых растворов), но и от незначительного изменения расстояния между составляющими их атомами. Ко второму случаю относятся и напряженные слои полупроводников, особенно, когда они получены на диэлектрических подложках при рассогласовании $> 1\%$. Возникает целый ряд вопросов, начиная от разработки методов получения совершенных слоев в большом диапазоне их толщин, особенно и нанодиапазона, и включая исследования различных свойств – регистрации их изменения по сравнению с ненапряженным состоянием.

Физические и технологические проблемы в напряженных слоях исследовались на примере полупроводников $A^{IV}B^{VI}$. Ниже приводятся результаты, полученные впервые за последние годы и представлены также текущие исследования:

1. Разработана модернизированная технология молекулярной эпитаксии с «горячей стенкой» для выращивания слоев полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ (PbSe, PbTe, PbSnTe, PbSnSe, PbSSe) на диэлектрических подложках KCl, NaCl, BaF₂, CaF₂ и высокоомном Si (рис.1) [1]. В диапазоне температур роста (температур подложки) 200-350°C и температур источников – поликристаллов соответствующих составов – 450-510°C и скорости роста 0,1 -50 нм/с получались слои толщиной 20 нм-4 мкм. Установлено два этапа роста – медленный и ускоренный (рис.2). Регулируя экспериментальные условия, можно менять время «задержки» - первого этапа, связанного с зарождением и объединением островков – зародышей и скорости роста на втором этапе послойного наращивания [2]. Для быстрого сплошного наращивания слоев важно увеличить тангенциальную скорость уже зародышей, которое достигается совмещением естественных и экспериментальных условий. При большом исходном рассогласовании между слоем и подложкой быстро растет упругая энергия слоя с толщиной и также быстро (при толщинах \sim единиц нм) из-за релаксации напряжений возникает дислокационная область у границы раздела подложка-слой. Сильно напряженные атомные связи перестраиваются, укрепляется взаимодействие между атомами подложки и слоя. Это приводит к уменьшению критического размера зародышей, росту их числа и к ускорению

сплошного заравнивания слоя. Такой процесс усиливается понижением нормальной скорости роста слоев, которое достигается увеличением расстояния открытого края ампулы с источником эпитаксии до подложки в технологической системе. При толщинах слоев выше 20нм они растут сплошными и монокристаллическими. При рассогласовании между подложкой и слоем >10-12% плотность дислокаций высока и также происходит перестройка атомов в слое, но взаимодействие с подложкой заметно ослабевает, слои часто растут с трещинами и намного с ухудшенными характеристиками. На рис.3 приводится зависимость тангенциального параметра решетки от длительности роста для нескольких групп слоев с отличающимися толщинами, выращенных при различном удалении подложки от кварцевой ампулы. Как видно, на линии б, слои с толщинами 55-180 нм имеют наивысшие тангенциальные параметры решеток и весьма пригодны для различных приложений [3].



Регулирование скорости роста слоев ($T_{под} = 240^{\circ}C$)

| Варианты | Температура источника $T, ^{\circ}C$ | Расстояние края ампулы от подложки h , мм | Скорость роста слоев v , нм/с |
|----------|--------------------------------------|---|---------------------------------|
| I | 470 | 12 | 0,5 - 2 |
| II | 470 | 1 | 4 - 6 |
| III | 510 | 1 | 8 - 11 |

Рис.1. Схема конструкции для выращивания эпитаксиальных слоев методом «горячей» стенки: 1 – подложка; 2- заслонка; 3 – радиационный экран; 4 – кварцевая ампула; 5 – источник; 6 – нагреватель; 7 – трубка для паров селена; 8 – экраны; 9 – источник паров селена

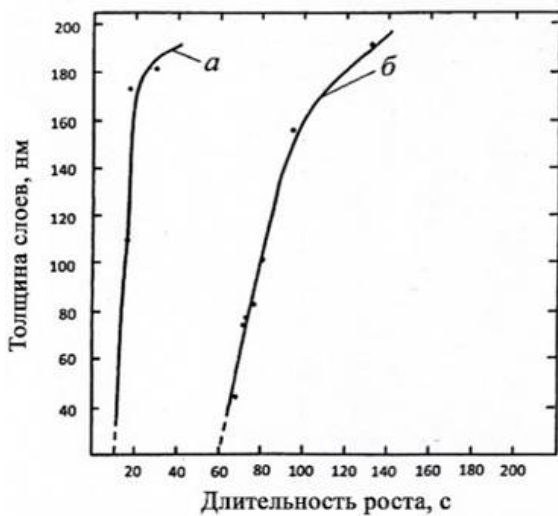


Рис.2. Зависимость толщины эпитаксиальных слоев PbSeот времени роста при различных расстояниях ампулы с источником эпитаксии до подложки: а) $l=1\text{мм}$, б) $l=12\text{мм}$

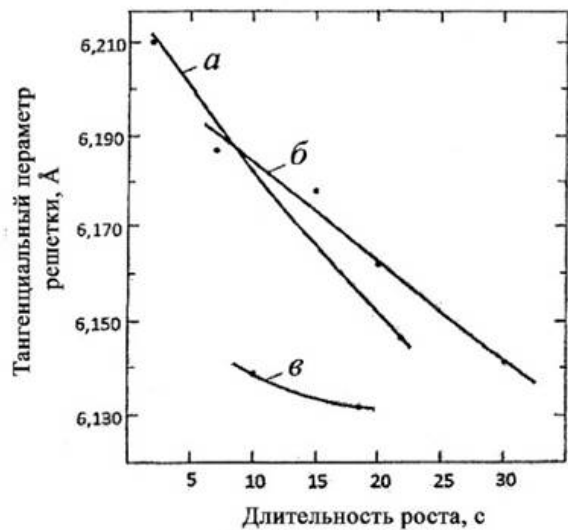


Рис.3. Зависимость тангенциального параметра решетки от длительности роста слоев на втором этапе: а) $l=2,5\text{мм}$, $T_{ист.}=470^{\circ}C$, б) $l=12\text{мм}$, $T_{ист.}=470^{\circ}C$, в) $l=1\text{мм}$, $T_{ист.}=510^{\circ}C$

Дополнительное возрастание тангенциального параметра решетки ожидается при дальнейшем увеличении расстояния между подложкой и ампулой до 20мм и при этом время «задержки» будет достигать ~ 100с(рис.4а,б) [4].

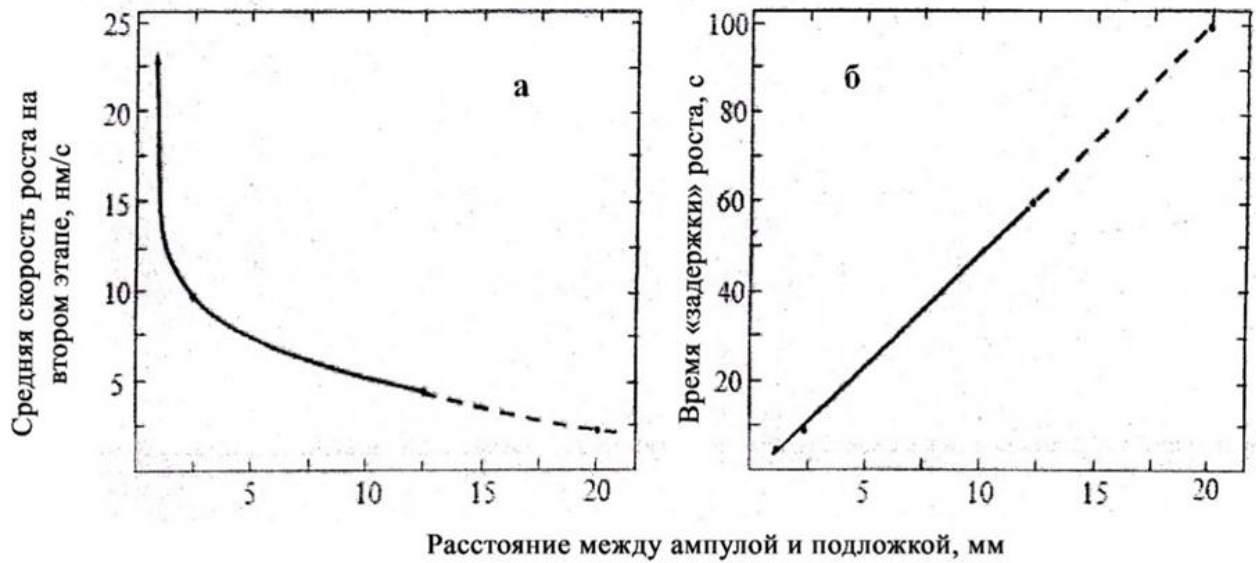


Рис.4.Зависимость скорости (а) и времени «задержки» роста (б) эпитаксиальных слоев PbSe от расстояния ампулы с источником эпитаксии до подложки

2.Для многих задач целесообразно достижение максимальных остаточных деформаций в слоях, которые оцениваются через определяемые значения тангенциальных параметров кристаллической решетки напряженного и ненапряженного слоев (соответствующей подложке такого же состава): $\epsilon = (a_{сл.} - a_{п.})/a_{п.}$ ($a_{сл.}$ и $a_{п.}$ – параметры решеток слоя и подложки). С приростом толщины слоев из-за релаксации напряжений остаточные деформации, естественно, уменьшаются и максимальные их значения выявляются в нанодиапазоне толщин, например, для случая роста слоя PbSe на подложке KCl – 0,018 (исходное рассогласование 0,026), а при росте слоя PbSe на подложке NaCl – 0,023 (исходное рассогласование ~ 0,08). Невысокие остаточные деформации наблюдаются и в слоях толщиной вплоть до 4мкм – сверхкритических структурах.

Таблица 1. Тангенциальные параметры кристаллических решеток, толщины и относительные рассогласования - деформации для эпитаксиальных слоев PbSe, выращенных на подложках KCl (100)

| № | Слой | Температура подложки T, °C | Температура источника T, °C | Время роста t, с | Тангенц. параметр решетки a, Å | Толщина слоев d, нм | Скорость роста слоев v, нм/с | Относит. рассоглас.-деформация $\epsilon = \frac{a_{сл} - a_{PbSe}}{a_{PbSe}} \cdot 10^2$ |
|----|--------|----------------------------|-----------------------------|------------------|--------------------------------|---------------------|------------------------------|---|
| 1 | СЛ-69 | 240 | 510 | 3600 | 6,126(4) | 1830 | 0,5 | 0 |
| 2 | СЛ-216 | 240 | 450 | 300 | 6,136(4) | 193 | 0,6 | 0,163 |
| 3 | СЛ-237 | 280 | 470 | 90 | 6,142(1) | 157 | 1,8 | 0,261 |
| 4 | СЛ-578 | 240 | 470 | 30 | 6,149(0) | 181 | 6 | 0,375 |
| 5 | СЛ-541 | 300 | 470 | 80 | 6,162(4) | 101 | 1,8 | 0,586 |
| 6 | СЛ-558 | 300 | 470 | 77 | 6,172(0) | 83 | 1,1 | 0,751 |
| 7 | СЛ-555 | 300 | 470 | 75 | 6,177(4) | 68 | 0,9 | 0,833 |
| 8 | СЛ-562 | 300 | 470 | 67 | 6,188(2) | 52 | 0,8 | 1,012 |
| 9 | СЛ-185 | 240 | 450 | 360 | 6,203(3) | 41 | 0,1 | 1,257 |
| 10 | СЛ-180 | 240 | 450 | 315 | 6,211(3) | 29 | 0,1 | 1,379 |
| 11 | СЛ-177 | 300 | 450 | 330 | 6,219(5) | 22 | 0,07 | 1,518 |

Критическая толщина, при которой возросшая с толщиной слоя упругая энергия передается на создание дислокаций и их перемещение, например, для роста слоя PbSe на подложке KCl составляет ~ 2нм. Реализация сверхкритических структур является следствием высокой концентрации нестехиометрических дефектов, размещающихся, точнее аннигилирующих, в ядрах дислокаций, вызывающих их торможение и переход к движению от скольжения к «переползанию», значительно более медленному. Веским подтверждением такого влияния является возрастание уровня остаточных деформаций в слоях при относительно повышенных температурах 280-320°C и малых скоростях роста ~ 1нм/с (таблица 1), когда миграция дефектов усиливается и их перемещение поспевает за скоростью роста [5]. Прирост в тангенциальных параметрах решеток напряженных слоев подтверждает, что деформации в них определяются рассогласованием с подложкой, а не с различием в их температурных коэффициентах расширения (когда тангенциальный параметр решетки слоев изменяется в обратную сторону). При исследовании структуры слоев для одной группы, например, при изменении их толщины, от 300 до 70нм, показано, что размер субзерен меняется от 90 до 30нм и при разориентации между ними ~ однадесятитысячная минуты критическая толщина составляет более 100нм и соответственно релаксация напряжений на границе субзерен не имеет места. В то же время разориентация между отдельными кристаллитами-блоками, когда они выявляются, на их границе достигает единиц минут и релаксацию напряжений в этом случае уже необходимо учитывать. Размеры субзерен и напряжения в слоях определяются по полуширинам рентгеновских дифрактограмм слоев, записанных при отражении от плоскостей (200) и (600) (рис. 5I, II).

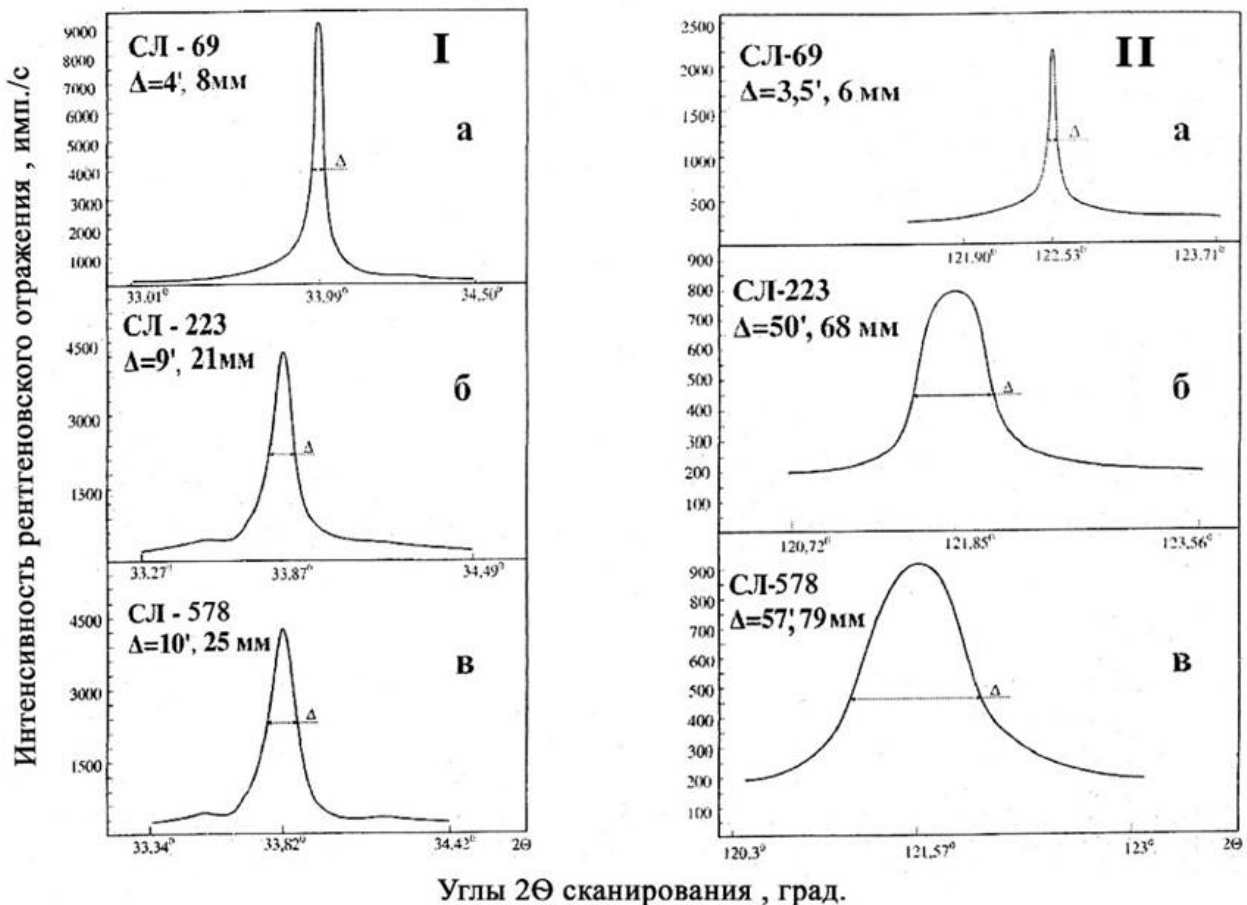


Рис.5. Дифрактограммы θ - 2θ сканирования эпитаксиальных слоев PbSe различной толщины :I - плоскость рентгеновского отражения (200), II - плоскость рентгеновского отражения (600)

В таблице 2 приводятся их значения для другой группы слоев в широком диапазоне их толщин 1830 - 180нм и размеры субзерен меняются в пределах 200-70нм [6,7]. Сравнивая оба случая, можно заметить, что при малых толщинах слоев размер субзерен быстрее уменьшается.

Таблица 2. Данные по анализу дисперсности и напряжения в эпитаксиальных слоях PbSe

| № СЛ | Толщина слоя, мкм | Танг. параметр решет. a_r , Å | Размер кристалл. D, нм | $\varepsilon = \frac{a_r - a_{PbSe}}{a_{PbSe}} \cdot 10^3$ | $\beta \cdot 10^3$, рад | | $\varepsilon = \frac{\Delta a}{a} = \frac{\beta_{(600)}}{4 \operatorname{tg} \theta} \cdot 10^3$ | $a_r = a_{PbSe} \left(\frac{\beta}{4 \operatorname{tg} \theta} + 1 \right)$ Å | $\sigma = \frac{E}{1-\nu} \cdot \frac{\beta}{4 \operatorname{tg} \theta} \cdot 10^9$ дин/см ² |
|------|-------------------|---------------------------------|------------------------|--|--------------------------|-------|--|---|---|
| | | | | | (200) | (600) | | | |
| 69 | 1,83 | 6,126(5) | 205 | 0,16 | 0,87 | 1,13 | 0,12 | 6,127(0) | 0,09 |
| 223 | 0,284 | 6,140(6) | 90 | 2,21 | 2,31 | 14,6 | 2,17 | 6,140(1) | 1,7 |
| 578 | 0,181 | 6,149(0) | 72 | 3,61 | 2,70 | 17,0 | 3,21 | 6,148(2) | 2,6 |

3. Наряду со структурной характеристикой в слоях проведено исследование оптических характеристик и энергетического спектра носителей заряда путем развития метода оптического пропускания в диапазоне длин волн 2,5-25 мкм и в интервале толщин слоев 50 нм - 4 мкм. Оптическая характеристика – определение показателей преломления, коэффициентов отражения и поглощения, диэлектрической постоянной и ширины запрещенной зоны на первом этапе осуществлялась по спектрам пропускания слоев толщиной > 0,7 мкм, на которых регистрировалась интерференционная картина. Анализ спектров проводился по модели интерферометра Фабри-Перо [8], исходя из параллельности поверхности слоя границе подложка-слой и когда длина когерентности значительно выше толщины слоев.

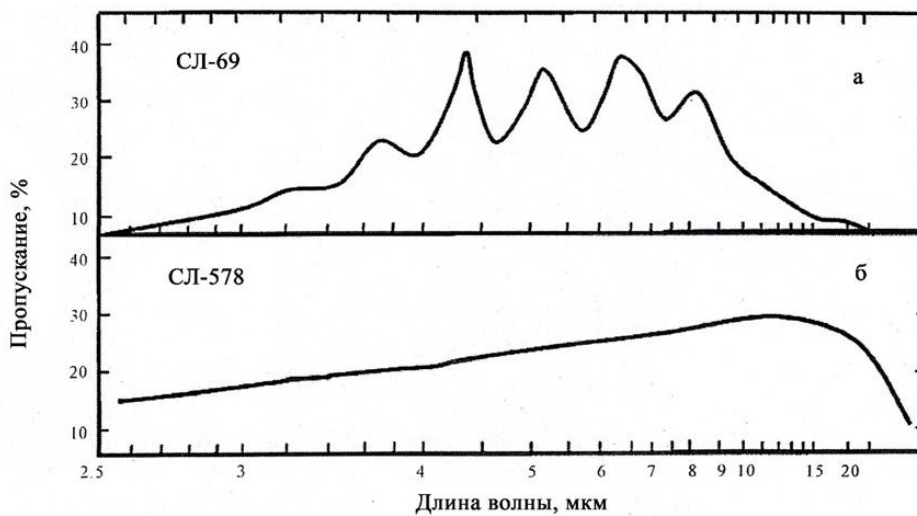


Рис.6. Спектры оптического пропускания эпитаксиальных слоев PbSe при толщинах: а) d=1,83 мкм , d=0,181 мкм

С учетом когерентности отраженные пучки складываются по амплитуде. На рисунке 6 представлены спектры пропускания для слоев PbSe с толщиной ~1,8 мкм и на порядок меньшей ~180 нм. При таких изменениях толщин интерференционная картина видоизменяется в монотонно возрастающую зависимость пропускания от длины волны, хотя и в этом случае анализ проводится в соответствии с моделью интерферометра. Из модели Фабри-Перо вытекает, что $2Nd = m\lambda$ в максимумах интерференционного спектра пропускания. При определенных значениях показателя преломления N определяются и коэффициенты отражения по амплитуде r и по интенсивности R, а из уравнения пропускания оценивается полный коэффициент поглощения α . При высокой концентрации носителей заряда $> 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ зона-зонное поглощение по спектру рассчитывается путем вычитания поглощения на свободных носителях $\alpha_{\text{св.н.}}$ из полного поглощения α . При спрямлении квадрата произведения разности $\alpha - \alpha_{\text{св.н.}}$ на энергию фотона, т.е. функции $[(\alpha - \alpha_{\text{св.н.}})h\nu]^2 = f(h\nu)$ устанавливается ширина запрещенной зоны. Если концентрация носителей заряда в слоях превышает $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, то необходимо учитывать также вырождение носителей введением

коэффициента $1/\gamma$, зависящего от ориентировочного значения ширины запрещенной зоны E_g и положения уровня Ферми E_F . В результате спрямления квадратов произведения коэффициентов поглощения на энергию фотона в этом случае уже определяется ширина запрещенной зоны для чистого полупроводника. На рисунках 7 и 8 представлены спектральные зависимости функции $[(\alpha - \alpha_{св.н.})/1/\gamma h\nu]^2 = f(h\nu)$ для слоев с толщинами 1,8 мкм и 180 нм. Определенные по спрямлениям $[(\alpha - \alpha_{св.н.})/1/\gamma h\nu]^2$ ширины запрещенной зоны составляют 0,286 и 0,331 эВ соответственно для обоих случаев. Т.е. в напряженном слое с деформацией $\epsilon=0,004$ ширина запрещенной зоны возрастает ~ на 0,05 эВ. Дисперсионная зависимость $N^2 = f(\lambda^2)$ построена в результате определения показателей преломления в максимумах интерференционных линий, как указывалось выше, для слоя PbSe с толщиной 1,83 мкм (рис.9).

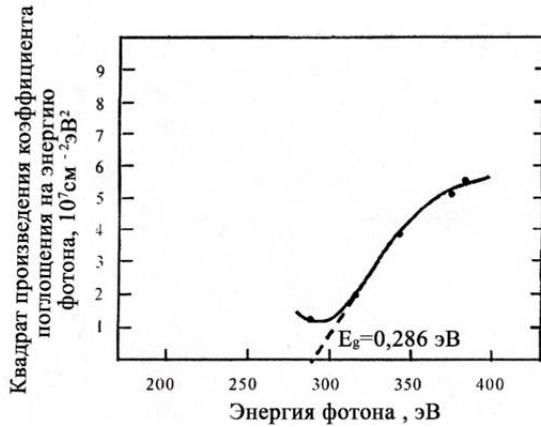


Рис.7. Зависимость квадрата произведения коэффициента поглощения $(\alpha - \alpha_{св.н.})/1/\gamma$ на энергию фотона от энергии фотона для эпитаксиального слоя PbSe толщиной 1,83 мкм

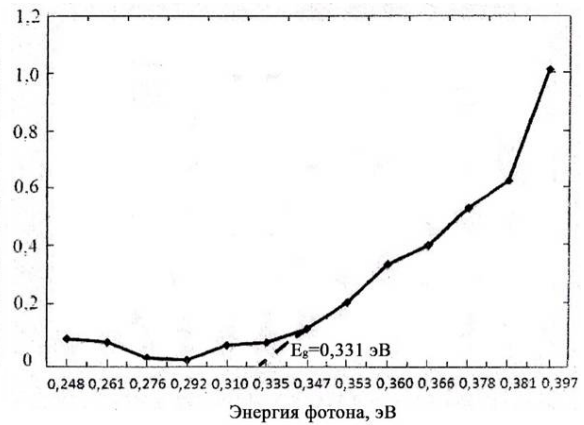


Рис.8. Спектральная зависимость квадрата произведения коэффициента поглощения $(\alpha - \alpha_{св.н.})/1/\gamma$ на энергию фотона от энергии фотона для эпитаксиального слоя PbSe толщиной 0,181 мкм

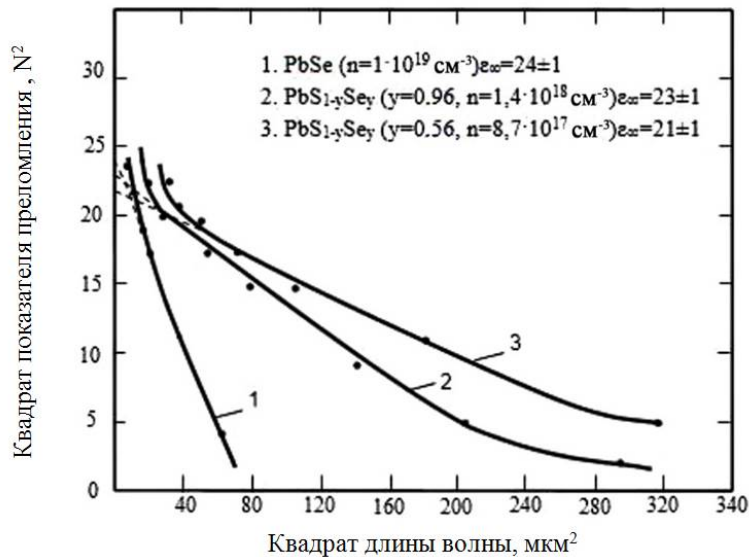


Рис.9. Дисперсионная зависимость квадрата показателя преломления от квадрата длины волны для разных составов $PbS_{1-y}Se_y$

Из аппроксимации дисперсионной зависимости $N^2 = f(\lambda^2)$ к нулевым значениям λ определялась высокочастотная диэлектрическая постоянная ϵ_∞ . Важный вопрос – изменение показателя преломления при деформации оценивалось путем анализа производных ширины запрещенной зоны по деформации и показателя преломления по энергии (длине волны), т.е. по дисперсионной зависимости [4]. Например, при деформации $\epsilon \sim 0,008$ показатель преломления возрастает на единицу, а изменение коэффициента отражения не превышает 10%. Соответственно, если без учета зависимости оптических характеристик от деформации по результатам спрямления ширина

запрещенной зоны составляла $\sim 0,450\text{эВ}$, то при ее учете она была уже $0,465\text{эВ}$, т.е. с учетом погрешности ее определения $0,005\text{-}0,006\text{эВ}$ менялась весьма незначительно. По смещению спектров поглощения и изменению цвета слоев можно судить о степени деформации в слоях. В качестве примера, для толщины слоя 70нм при деформации $\varepsilon \sim 0,008$ ширина запрещенной зоны, как в первом приближении было указано выше, возрастает в целом на $0,15 - 0,16\text{эВ}$ [10]. Цвет слоев при толщинах 4мкм и 70нм меняется от блестящего металлического до прозрачного. Таким образом, смещение спектра и изменение цвета слоев в условиях деформации могут служить для их первичной характеристики. При анализе спектров поглощения между основным краем и поглощением на свободных носителях выявлено дополнительное поглощение [11].

4. Выше на примере напряженных нанослоев PbSe показаны изменения структурных и оптических свойств по сравнению с ненапряженным состоянием. Исследования эпитаксиальных слоев PbTe , PbSSe , PbSnSe , PbSnTe позволили определить и их структурные и оптические характеристики. В частности, на рис.9 приводится дисперсионная зависимость $N^2=f(\lambda^2)$ для твердых растворов $\text{PbS}_{1-y}\text{Se}_y$ с содержанием PbSe – $0,96$ и $0,56$ и с несколько разными концентрациями носителей заряда $8,7 \cdot 10^{17}$ и $1,4 \cdot 10^{18}\text{см}^{-3}$. Несмотря на меньшие значения ширины запрещенной зоны PbSe из-за высокой концентрации носителей в них эта зависимость проходит ниже, чем для более широкозонных составов PbSSe . Высокая концентрация носителей заряда в PbSe сказывается и на различных наклонах зависимостей для слоев PbSe и PbSSe . В соответствии с принятыми соотношениями высокочастотная диэлектрическая постоянная слабо зависит от концентрации носителей и уменьшается с возрастанием ширины запрещенной зоны $\varepsilon_\infty=24$ для PbSe , а для $\text{PbS}_{1-y}\text{Se}_y$ при $y=0,56$ $\varepsilon_\infty=21$. Благодаря высокому поглощению рентгеновского излучения полупроводниками $A^{IV}B^{VI}$ развиты методы прецизионного исследования параметра кристаллической решетки (состава и деформации), субструктуры и толщины слоев. В частности, толщина слоев определяется путем установления линейного коэффициента рентгеновского поглощения μ произвольного состава твердого раствора через плотности, коэффициенты поглощения и весовые доли компонентов (таблица 3) [12].

Таблица 3. Данные по составам, весовым долям, коэффициентам рентгеновского поглощения и толщинам эпитаксиальных слоев $\text{PbS}_{1-y}\text{Se}_y$

| № | Слой | Состав, у | Весовая доля свинца P_{Pb} | Весовая доля серы P_S | Весовая доля селена P_{Se} | Плотность $\rho, \text{г/см}^3$ | $(\mu/\rho)_{Pb}, \text{см}^2/\text{г}$ | $(\mu/\rho)_S, \text{см}^2/\text{г}$ | $(\mu/\rho)_{Se}, \text{см}^2/\text{г}$ | $(\mu/\rho)_{PbSSe}, \text{см}^2/\text{г}$ | $\mu, \text{см}^{-1}$ | d, мкм |
|---|---------|-----------|------------------------------|-------------------------|------------------------------|---------------------------------|---|--------------------------------------|---|--|-----------------------|--------|
| 1 | С.Т-522 | 0,948 | 0,574 | 0,008 | 0,418 | 8,20 | 340 | 137 | 126 | 253,6 | 2079,5 | 1,2 |
| 2 | С.Т-523 | 0,958 | 0,574 | 0,007 | 0,419 | 8,27 | 340 | 137 | 126 | 253,6 | 2097,3 | 1,6 |
| 3 | С.Т-530 | 0,958 | 0,574 | 0,007 | 0,419 | 8,27 | 340 | 137 | 126 | 253,6 | 2097,3 | 1,5 |

На рисунке 10 представлено спрямление квадратов произведения разности коэффициентов поглощения $\alpha - \alpha_{\text{св.н.}}$ на энергию фотона для слоя PbSe с толщиной $\sim 70\text{нм}$. В этом случае оптические характеристики оценивались с учетом деформации в слое и, как было указано выше, полученное значение ширины запрещенной зоны отличается от определенного без учета деформации на $0,015\text{эВ}$. Здесь же видно, что в области энергий $0,310\text{-}0,320\text{эВ}$ обнаружено дополнительное поглощение, что может указывать на появление в условиях деформации дополнительного уровня в зоне проводимости, расположенного выше ее основного минимума. На рис.11а,б представлено спрямление квадратов произведения разности коэффициентов поглощения $\alpha - \alpha_{\text{св.н.}}$ на энергию фотона для слоев $\text{PbS}_{1-y}\text{Se}_y$ ($y=0,56$) и PbTe . Ширины запрещенной зоны составляют $0,340$ и $0,309\text{эВ}$ соответственно – это при толщинах, превышающих 2мкм . Отметим, что при толщинах $< 0,7\text{мкм}$ слои PbTe на подложках CaF_2 , BaF_2 и KCl выявляют уменьшение ширины запрещенной зоны в соответствии с их сжатием на таких подложках [13,14]. В условиях отсутствия значительной деформации на рис.11а,б дополнительное поглощение выявляется в виде спадающей по энергии полосы, что можно связать с виртуальным переходом на уже существующий другой минимум в зоне проводимости PbSSe и PbTe . Возрастание ширины запрещенной зоны в напряженных слоях PbSe при изменении, например, их толщины от 2мкм до 70нм в пределах $\sim 0,15\text{эВ}$ превышает возможность ее варьирования путем изменения состава в твердых растворах $\text{PbS}_{1-y}\text{Se}_y$ – $0,12\text{эВ}$

(рис.12) . При «отрицательных» давлениях в слоях PbSe диапазон перестройки энергии излучения при 300К простирается от 0,25 до 0,5эВ - (2,5-5)мкм.

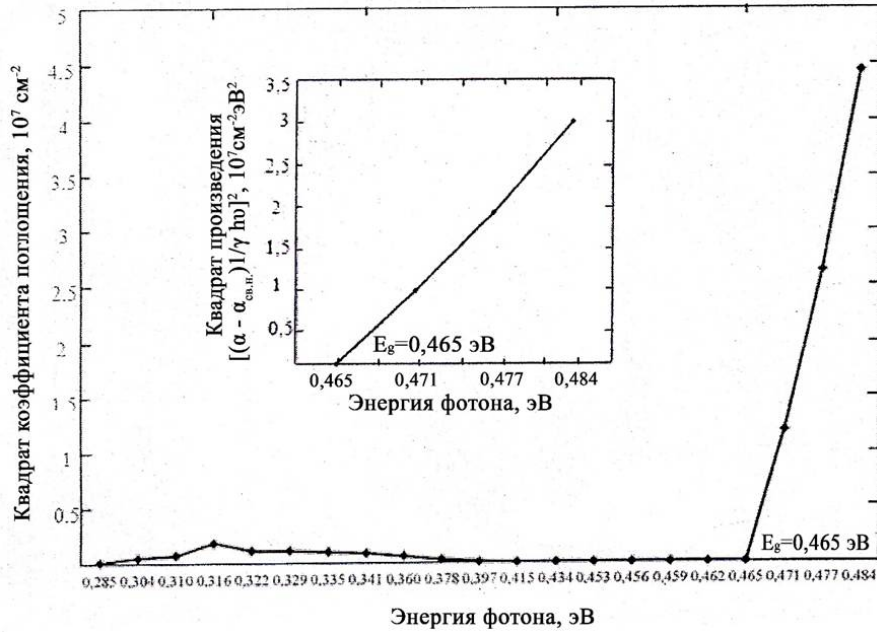


Рис.10. Зависимость квадрата коэффициента поглощения $(\alpha - \alpha_{св.н.})l/\gamma$ от энергии фотона, на вставке дается спрямление на узком участке спектра для квадрата произведения коэффициента поглощения на энергию фотона

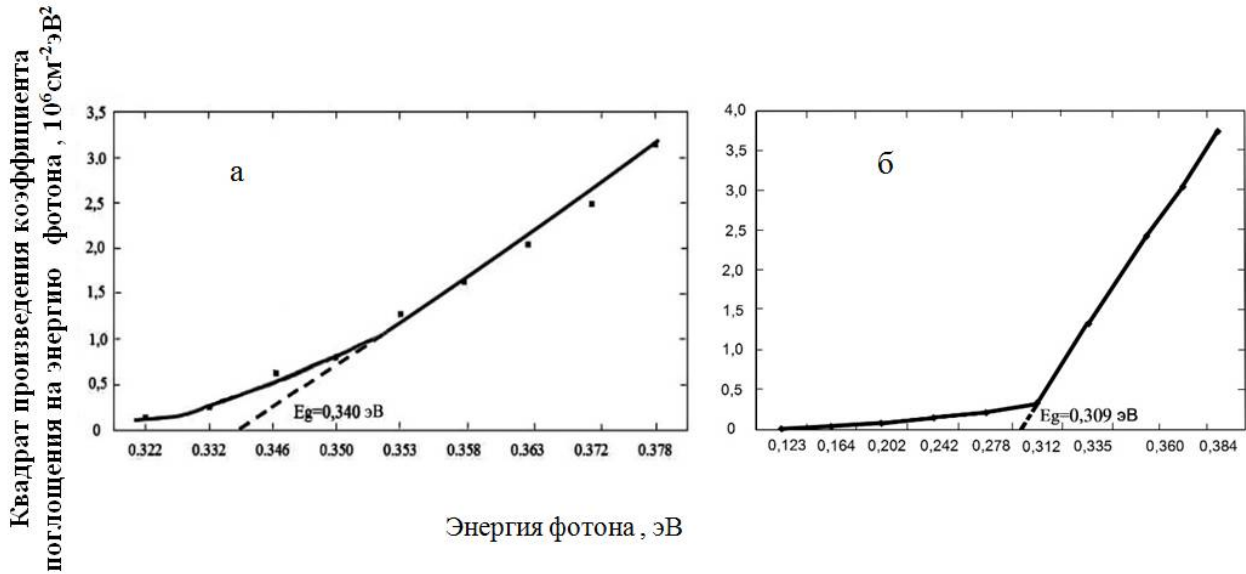


Рис.11. Зависимость квадрата произведения коэффициента поглощения на энергию фотона от энергии фотона : а) для слоя $PbS_{1-y}Se_y$ ($y=0,56$), б) для слоя PbTe

5. Несмотря на то, что для напряженного слоя PbSe толщиной, например, 70нм параметр кристаллической решетки по сравнению с ненапряженным слоем (монокристаллом) изменяется лишь на $0,05\text{\AA}$, что меньше одного процента от исходного значения, ширина запрещенной зоны возрастает приблизительно на 50% от исходного значения. Эти изменения происходят при деформации растяжения, напряжении, соответствующего «отрицательному» давлению $\sim 10-15$ кбар. Это является иллюстрацией того, что при незначительном смещении атомов в слое (кристалле) свойства их изменяются существенно. Исходя из оценки энергии локализации $E = h^2n^2/8md^2$ (n – номер уровня, d – толщина слоя), при толщине 70нм смещение энергии соответствует нескольким тысячным эВ. Таким образом, изменения в энергетическом спектре, связанные с анизотропной

деформацией оказываются значительно выше, чем влияние квантовых эффектов, которые проявляются при расщеплении уровней в уже смещенном спектре.

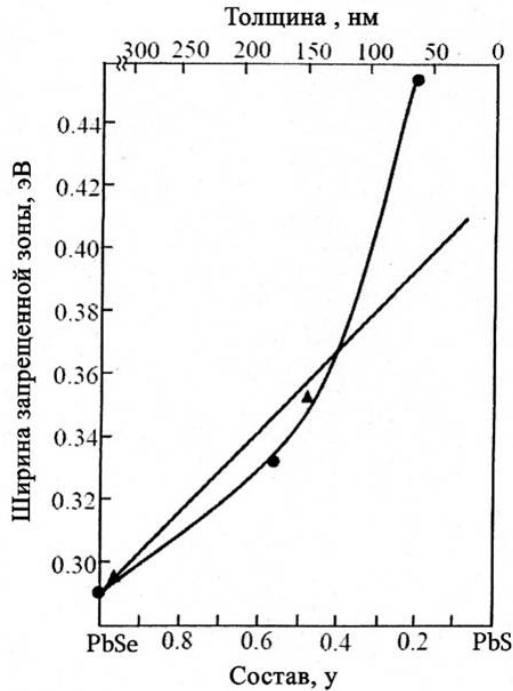


Рис.12. Зависимость ширины запрещенной зоны эпитаксиальных слоев :
 а) (●) от толщины слоев PbSe ,
 б) (▲) от состава твердых растворов PbS_ySe_{1-y}

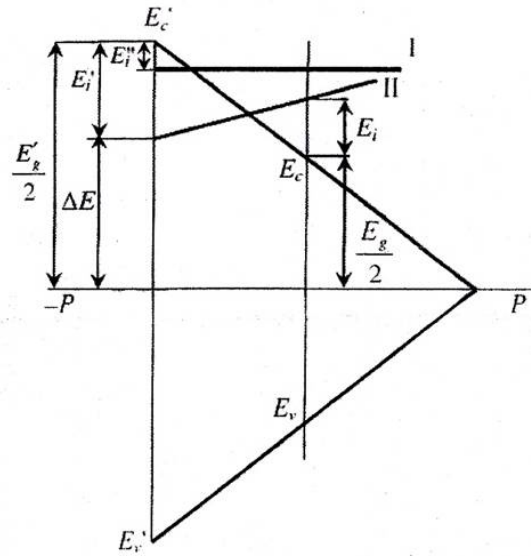


Рис.13. Смещение примесных уровней Cr и In в запрещенной зоне полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ при «отрицательном» давлении :
 I – PbSnSe : Cr , II – PbSnTe : In

В таблице 4 для слоев в пределах толщин 1830-70нм приведены реализуемые в них деформации и развиваемые напряжения, а также соответствующие возросшие значения ширины запрещенной зоны [16]. Эффективное «отрицательное» давление может привести к формированию новой кристаллографической фазы с сочетанием таких свойств как высокая подвижность, теплопроводность, очень интересны также исследования по сверхпроводимости в таких слоях с пониженной размерностью. Особый интерес представляет изучение легированных примесями с переменной валентностью, таких как Cr, Mn напряженных нанослоев полупроводников $A^{IV}B^{VI}$.

Таблица 4. Данные по тангенциальным параметрам решетки, деформациям (напряжениям) и соответствующим ширинам запрещенной зоны в слоях PbSe

| № | Слой | Толщина слоев d, нм | Тангенц. параметр решетки $a_t, \text{Å}$ | Относит. рассоглас.-деформация $\epsilon = \frac{a_{сл} - a_{PbSe}}{a_{PbSe}}$ | Напряжение $\sigma = \frac{E}{1-\nu} \epsilon$, кбар | E_g , эВ |
|---|--------|---------------------|---|--|---|------------|
| 1 | СЛ-69 | 1830 | 6,126(4) | 0 | 0 | 0,286 |
| 2 | СЛ-578 | 181 | 6,149(0) | 0,0038 | 5,6 | 0,331 |
| 3 | СЛ-304 | 119 | 6,154(8) | 0,0047 | 6,8 | 0,355 |
| 4 | СЛ-551 | 72 | 6,175(4) | 0,0081 | 11,9 | 0,456 |
| 5 | СЛ-562 | 52 | 6,188(2) | 0,010 | 14,7 | 0,472 |

Как известно, примеси с переменной валентностью в полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$ могут эффективно компенсировать носители обоих знаков. Отличаясь также меньшим атомным радиусом, чем компоненты соединений $A^{IV}B^{VI}$, эти примеси при их достаточной концентрации осуществляют блокирование дислокаций и расширяют предел упругости нанослоев по сравнению с нелегированными слоями с той же толщиной. Это вытекает из результатов исследования внутреннего трения в легированных примесями Cr, Mn, Yb и другими бинарных соединений PbTe и PbSe. При этом критическая деформация возрастала до трех раз, а модуль упругости больше двух раз [17]. С другой стороны, уровни этих примесей при деформациях растяжения, «отрицательных» давлениях, смещаются к середине запрещенной зоны полупроводника и эффективно компенсируют концентрацию носителей заряда, в особенности, при высоком содержании электрически активных нестехиометрических дефектов [18]. На рис. 13 представлена схема смещения уровней примесей Cr и In в твердых растворах PbSnSe и PbSnTe. Для твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$, например, при $x=0,1$ и легировании Стего уровень при 77К отстоит на 0,031эВ от дна зоны проводимости, и концентрация носителей составляет $\sim 10^{14} \text{см}^{-3}$, уменьшаясь \sim на 5 порядков. В твердых растворах PbSnSe и PbSnTe уровни примесей с переменной валентностью быстрее смещаются к середине запрещенной зоны и заметнее компенсируют концентрацию носителей заряда. В твердых растворах эти примеси приводят и к большему возрастанию предела упругости.

6. На основе напряженных нанослоев, в том числе легированных примесями с переменной валентностью, осуществляется ряд важных применений:

а) Значительное понижение концентрации носителей заряда в полупроводниках при легировании примесями с переменной валентностью приводит к реализации диэлектрического состояния в условиях однородности слоев. В нанослоях при их растяжении происходит углубление уровней этих примесей в запрещенной зоне, стабилизация уровня Ферми и расширение диапазона упругой деформации, соответственно и большее возрастание ширины запрещенной зоны [19]. Открывается перспектива создания на их основе ИК фотоприемников с высокой чувствительностью и при более высоких рабочих температурах, а также отличающихся высоким быстродействием и низкими темновыми токами;

б) На основе напряженных слоев реализуются лазеры с оптическим возбуждением, в которых при изменении их толщины возникает возможность широкой перестройки частоты излучения. Для инжекционных лазеров, особенно на основе многокомпонентных твердых растворов, в которых в технологическом процессе создания структур из-за взаимной диффузии компонентов, например, в структуре PbSe–PbSnSeTe-олова и теллура возникает значительное рассогласование в активной области, деформация, превосходящая предел упругости и приводит к заметному понижению времени жизни носителей заряда при возросшей дефектности и к повышению пороговых токов. При легировании активных областей таких лазеров примесями Cr и особенно Mn можно предотвратить негативное влияние диффузионного рассогласования за счет возрастания при этом критической деформации и модуля упругости и соответственно понизить пороговый ток в 5-6 раз [20,21]. Рабочую температуру лазеров (включая и непрерывный режим работы) можно повысить вплоть до комнатной температуры;

в) С обнаружением дополнительного поглощения и при высокой прозрачности с утоньшением слоев на основе напряженных нанослоев можно создавать модуляторы ИК излучения. При инжекции носителей заряда в такой тонкий слой поглощение может заметно меняться, что приводит к большому динамическому диапазону ИК модуляторов;

г) Интересная перспектива использования таких нанослоев связана с обнаружением у них повышенной химической активности – они могут служить чувствительным элементом сенсоров широкого применения. Такие сенсоры обладают способностью регистрировать ультранизкие концентрации компонентов атмосферной среды, а также взрывоопасные и ядовитые вещества. Наноструктурные сенсоры придут на смену менее чувствительным медленным устройствам.

д) Дальнейшее расширение направлений практического применения может быть связано с получением ультратонких нанослоев, в которых могут реализовываться ранее неизвестные двумерные кристаллографические фазы. На примере двумерной фазы графена показано, что структуры подобного рода отличаются такими неожиданными свойствами как нулевая эффективная масса электрона, аномально высокие проводимость и теплопроводность вдоль слоя. Ясно, что эти нанослои являются материалами будущего в микроэлектронике и фотонике.

На примере слоев PbSe в широком диапазоне их толщин изучены структурные и оптические свойства. Исследовались также слои PbTe, PbSnSe, PbSnTe, PbSSe различной толщины, включая и нанодиапозона, и часто с меньшей концентрацией носителей заряда, чем в слоях PbSe. Благодаря высокому поглощению рентгеновского излучения этими материалами удалось развить методы прецизионного изучения параметра кристаллической решетки (состава и деформации), субструктуры и толщины слоев. По результатам рентгеновских и оптических исследований указанных слоев можно заключить, что при деформации сжатия относительное изменение параметра решетки и ширины запрещенной зоны существенно меньше, чем при деформации растяжения.

В твердых растворах, особенно, PbSnSe и PbSnTe, уровни примесей с переменной валентностью быстрее смещаются к середине запрещенной зоны и заметнее компенсируют концентрацию носителей заряда. С другой стороны, в твердых растворах эти примеси приводят и к большему возрастанию предела упругости и поэтому эффективнее понижают пороговый ток в лазерах на основе тройных и четверных твердых растворов.

Исследования напряженных нанослоев показывают целесообразность их использования для управления свойствами полупроводников. Изменение в этих условиях характера взаимодействия между атомами вещества может привести к изменению тепловых, оптических и механических свойств. Выявляются неизвестные ранее возможности для создания новых приборов и устройств на основе низкомерных материалов (двумерных и одномерных). В большинстве случаев заметные напряжения в слоях выявляются при нанотолщинах. Так как для многих задач и материалов нанослои являются напряженными, то изучение напряженных нанослоев представляется как новое важное направление в материаловедении [22].

literatura – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Пашаев А.М., Даварашвили О.И., Енукашвили М.И., Гуляев Р.Г., Зломанов В.П. Сверхкритические наноструктуры PbSe/KCl. Georgian Engineering News, 2011, 2, 88-93.
2. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I.Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, R.G.Gulyaev, M.A.Dzagania. Supercritical Epitaxial Nanolayers of Lead Selenide. Book of Abstracts of the 3rd International Conference of the Physics of Optical Materials and Devices (ICOM 2012), Belgrade, 2012, 217.
3. Arif M.Pashaev, Omar I.Davarashvili, Megi I.Enukashvili, Zaira G.Akhvlediani, Revaz G.Gulyaev, Vladimir P.Zlomanov. Nanolayers of Lead Selenide on Potassium Chloride Substrates: Specific Features of Formation. Journal of Materials Science and Engineering, 2013, A3(4), 235-238.
4. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I. Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, R.G.Gulyaev, M.A.Dzagania. Variations of the parameters of PbSe nanolayers with change of their technology, IOP Conf.Series : Materials Science and Engineering, 2015, 77, 012017, 1-8.
5. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I.Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, L.P.Bychkova, M.A.Dzagania, V.P.Zlomanov. Investigation of Strained Lead Selenide Nanolayers . Global Journal of Engineering Science and Research Management (GIESRM), 2016, 3(6), 56-64.
6. Arif Pashaev, Omar Davarashvili, Zaira Akhvlediani, Megi Enukashvili, Revaz Gulyaev, Vladimir Zlomanov. Unrelaxed State in Epitaxial Heterostructures Based on Lead Selenide. Journal of Modern Physics, 2012, 3, 6, 502-510.
7. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, Z.G.Akhvlediani, M.I.Enukashvili, R.G.Gulyaev, V.P.Zlomanov. The Structure of Thin Epitaxial Layers of Lead Selenide. Journal of Materials Science and Engineering, 2013, A3(2), 116-121.
8. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледиани, Р.Г.Гуляев, В.П.Зломанов. Исследование структуры нанослоев селенида свинца при толщинах ≤ 70 нм. Известия НАНА, серия физ.-техн. и мат. наук, 2013, 33, 5, 31-40.
9. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, Z.G.Akhvlediani, M.I.Enukashvili, L.P.Bychkova, M.A.Dzagania. Study of the Forbidden Gap Width of Strained Epitaxial Lead Selenide Layers by Optical Transmission. Journal of Materials Science and Engineering, 2012, B2(2), 142-150.
10. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I.Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, R.G.Gulyaev, L.P.Bychkova. Epitaxial Lead Selenide Layers over a Wide Range of Their Thickness on Dielectric Substrates. Journal of Materials Science and Engineering, 2013, B3(2), 97-103.

11. Arif M.Pashaev, Omar I.Davarashvili, Megi I.Enukashvili, Zaira G.Akhvlediani, Larisa P.Bychkova, Revaz G.Gulyaev. On the Structural and Optical Properties of Lead Selenide Nanolayers. *Advanced Materials Research*, 2014, 2025-1026, 831-836.
Arif M.Pashaev, Omar I.Davarashvili, Megi I. Enukashvili, Zaira G.Akhvlediani, Larisa P.Bychkova, Revaz G.Gulyaev. On the Structural and Optical Properties of Lead Selenide Nanolayers. *Book of Abstracts of the 2014 International Conference on Advanced Materials, Structures and Mechanical Engineering*, Incheon, Korea, 2014, 57.
12. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, М.А.Дзагания, В.П.Зломанов. Дополнительное поглощение в оптических спектрах эпитаксиальных слоев селенида свинца. *Известия НАН Грузии*, 2014, 40, 4, 285-292.
13. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, Л.П.Бычкова, М.А.Дзагания, Р.Г.Гуляев, В.П.Зломанов. Параметр кристаллической решетки как индикатор технологии и свойств полупроводников $A^{IV}B^{VI}$. *Известия НАН Грузии*, 2014, 40, 2-3, 11-16.
14. A.M.Pashaev, O.I.Davarashvili, M.I.Enukashvili, Z.G.Akhvlediani, L.P.Bychkova, M.A.Dzagania, V.P.Zlomanov. Analysis of the absorption spectra of epitaxial lead telluride and lead selenide layers. *International Journal of Engineering and Innovative Technology (IJEIT)*, 2015, 4, 11, 193-198.
15. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, В.П.Зломанов. Study of the Optical Characteristics of Epitaxial $PbS_{1-y}Se_y$ Layers. *Global Journal of Engineering Science and Research Management (GJESRM)*, 2016, 3(2), 46-53.
16. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, В.П.Зломанов. Control of the Forbidden Gap Width by Varying the Composition and the Thickness of the Layers of IV-VI Semiconductors. *Nano Studies*, 2015, 12, 5-10.
17. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, З.Г.Ахвледiani, М.И.Енукашвили, Р.Г.Гуляев, В.П.Зломанов. Stretching Strain – Effective “Negative” Pressure in Lead Selenide Nanolayers. *International Journal of Engineering and Innovative Technology (IJEIT)*, 2014, 3, 11, 318-323.
18. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, В.А.Алиев, Г.Ш.Дарсавелидзе, М.И.Енукашвили, В.П.Зломанов. Экспериментальное моделирование упругих свойств бинарных соединений $A^{IV}B^{VI}$. *Вести Академии Наук Азербайджана*, 2008, 5, 96-100.
19. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, В.П.Зломанов. Modeling of the dielectric state in $PbSnSe$ and $PbSnTe$ nanolayers with high concentration of nonstoichiometric defects. *Book of Abstracts of the 17th International Conference on Radiation Effects in Insulators*, Helsinki, 2013, PB-16.
20. Пашаев Ариф Мирджалалович, Даварашвили Омар Ильич, Алиев Вугар Амирович, Енукашвили Меги Ильинична, Зломанов Владимир Павлович. «Закономерная связь между одновременной стабилизацией уровня Ферми и преобразованием упругих свойств в узкозонных полупроводниках IV-VI с их трансформацией в диэлектрическое состояние». Научное открытие, диплом №340. Сборник кратких описаний научных открытий, научных гипотез. Международная Академия и Ассоциация авторов научных открытий, Москва, 2008.
21. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, М.А.Дзагания. On the Possibilities for Improving the Efficiency of Radiation in Heterostructures Based on IV-VI Semiconductors. *Book of Abstracts of the International Conference on Functional Materials and Nanotechnologies*, Tartu, 2013, PO-79.
А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, М.А.Дзагания. On the Possibilities for Improving the Efficiency of Radiation in Heterostructures Based on IV-VI Semiconductors. *Materials Science and Engineering*, 2013, 49, 012029, 1-4.
22. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, Л.П.Бычкова, М.А.Дзагания, В.П.Зломанов. О пороговом токе и мощности излучения ИК лазеров на основе многокомпонентных твердых растворов соединений $A^{IV}B^{VI}$. *Известия НАН Грузии*, 2015, 41, 4, 358-360.
23. А.М.Пашаев, О.И.Даварашвили, М.И.Енукашвили, З.Г.Ахвледiani, Л.П.Бычкова, Р.Г.Гуляев, М.А.Дзагания, В.П.Зломанов. Напряженные полупроводниковые слои на диэлектрических подложках (на примере материалов $A^{IV}B^{VI}$). *Препринт, МНЛ, Тбилиси*, 2016.

A^{IV}B^{VI} ნახევარგამტარების დაძაბული ნანოფენების დიელექტრიკულ საფენებზე კვლევა

არიფვაშაევი¹, ომარდავარაშვილი², მეგიენუქაშვილი², ზაირაახვლედიანი^{2,3},
რევაზულიაევი², ლარისაბიჩკოვა², მაიაძაგანია^{2,4}, ვლადიმერზლომანოვი⁵

¹ აზერბაიჯანის ავიაციის ეროვნული აკადემია, ბაქო

² ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

³ ე. ანდრონიკაშვილის სახელობის ფიზიკის ინსტიტუტი, თბილისი

⁴ კ. მელიქიშვილის სახელობის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი, თბილისი

⁵ მ. ლომონოსოვის სახელობის მოსკოვის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

rezieme

ცნობილია, რომ ნახევარგამტარების ნანოფენებში გამოვლენილია ცვლილებები მუხტის მატარებლების ენერგეტიკულ სპექტრში, გამოწვეული კვანტური ეფექტებით. მაგრამ ანიზოტროპული დეფორმაციისას ნახევარგამტარების ნანოფენების ენერგეტიკულ სპექტრში ვლინდება უფრო მეტი მერყეობა - მათ შემადგენელ ატომებს შორის უმნიშვნელო მანძილის ცვლილებისას მნიშვნელოვნად იცვლება სითბური, ოპტიკური და მექანიკური თვისებები. დეფორმირებული ნანოფენების ტექნოლოგია დაფუძნებულია ჰეტეროეპიტაქსიაზე მესრის პარამეტრების სხვაობის პირობებში. A^{IV}B^{VI} ნახევარგამტარების მაგალითზე ნაჩვენებია, რომ ~0,01 დეფორმაციისას აკრძალული ზონის სიგანე იზრდება ~50% ით საწყის მნიშვნელობასთან შედარებით. ამიტომ გამართლებულია სრულყოფილი დაძაბული ნანოფენების მიღება მართული მესრის ტანგენციალური პარამეტრით (ფენის სისქის ცვლილებით). წარმოდგენილია რეგულირებადი დაძაბულობის მქონე ნანოფენების ტექნოლოგიის შედეგები, აგრეთვე ფენების სუბსტრუქტურის გავლენა მაქსიმალური დეფორმაციის მისაღებად. განხილულია დაბალგანზომილებიანი (ერთი და ორგანზომილებიანი) დაძაბული ნანოფენების შექმნა და გამოყენებითი ხასიათის ინოვაციური კვლევები ნანოფენების გამოყენებით.

INVESTIGATION OF STRAINED NANOLAYERS OF A^{IV}B^{VI} SEMICONDUCTOR ON DIELECTRIC SUBSTRATES

A.M.Pashaev¹, O.I.Davarashvili², M.I.Enukashvili²,
Z.G.Akhvlediani^{2,3}, R.G.Gulyaev², L.P.Bychkova², M.A.Dzagania^{2,4} and V.P.Zlomanov⁵

¹ National Aviation Academy, Baku, Azerbaijan

² Iv. Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia

³ E. Andronikashvili Institute of Physics, Tbilisi, Georgia

⁴ P. Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry, Tbilisi, Georgia

⁵ M. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

SUMMARY

It is well known, that in semiconductor nanolayers revealed changes in the energy spectrum of the current carriers caused by quantum effects. But much more fluctuation in energy may observe under anisotropic deformation of the semiconductor nanolayers – at the little change of distance between atoms in nanolayers essentially modify thermal, optical and mechanical properties. Technology of the creation of strained nanolayers based on heteroepitaxy with difference in the lattice constants. In the case of IV-VI semiconductors it is shown that forbidden gap width under deformation ~0,01 increases ~ on 50% to its initial value. Therefore it is very important to create perfect strained nanolayers with operation of tangential lattice constant with change of their thickness. There are presented results on the technology of nanolayers with the regulation of the level of the strain and on their substructure for the achievement of the maximal deformation. There are also discussed investigation of nanolayers with one or two dimensionality and innovative applied investigations on the base of strained nanolayers.

**Ph₄P⁺ იონის ძვრადობის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა
სპირტხსნარებში**

ნინო კუპატაძე, ზოია მაჩაიძე, მზევინარ ბედინაშვილი, მიხეილ გვერდწითელი

ივანე ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

სპირტხსნარებში Ph₄P⁺ იონის ძვრადობის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ჩატარებულია ქვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში. აგებულია და შესწავლილია კორელაციური განტოლება. კორელაცია დამაკმაყოფილებელია

მათემატიკურ-ქიმიაში „აღნაგობა-თვისებები“ კორელაციური განტოლებების აგება და კვლევა, ამა თუ იმ ტოპოლოგიური ინდექსის გამოყენებით, ემყარება თვით მოლეკულის ან მისი გამარტივებული მოდელის სტრუქტურას [1-3]. იგივე ითქმის ქიმიური რეაქციების მათემატიკურ-ქიმიურ შესწავლაზე. ჩვენთვის უცნობია შემთხვევა, როდესაც ხსნარში მიმდინარე პროცესის მათემატიკურ-ქიმიური შესწავლა ტარდებოდა გამხსნელის მოლეკულის აღნაგობის (ან მისი მოდელის) საფუძველზე.

შესწავლილი იყო Ph₄P⁺ იონის ძვრადობა λ₀⁺ სხვადასხვა ერთატომიანი განშტოებული სპირტების ხსნარებში [4]. სწორედ ამ სპირტების (გამხსნელების) მოლეკულების აღნაგობის საფუძველზე ჩატარდა იონის ძვრადობის მათემატიკურ-ქიმიური გამოკვლევა ქვაზი-ანბ-მატრიცების მეთოდის ფარგლებში.

ანბ-მატრიცა წარმოადგენს მოლეკულური გრაფის თანაზიარობის მატრიცის მოდიფიცირებულ ვარიანტს [5]. მისი დიაგონალური ელემენტებია მოლეკულაში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრები, არადიაგონალური ელემენტებია ქიმიური ბმების ჯერადობები. ნებისმიერი ABC მოლეკულისათვის ანბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

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

სადაც: Z_A, Z_B და Z_C - A, B და C ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრებია, Δ_{AB}, Δ_{AC} და Δ_{BC} ქიმიური ბმების ჯერადობები A და B-ს, A და C-ს და B და C-ს შორის [6].

რადგან დიდი მოლეკულების შემთხვევაში გამოთვლები ძალზე შრომატევადია, ჩატარდა ანბ-მატრიცის მოდერნიზაცია ქვაზი-ანბ-მატრიცად. ამ მატრიცის ფორმალური სახე (1)-ის მსგავსია, მხოლოდ ამ შემთხვევაში; Z_A, Z_B და Z_C დიაგონალური ელემენტები ტოლია მოლეკულის გარკვეულ სტრუქტურულ ფრაგმენტებში შემავალი ქიმიური ელემენტების ატომური ნომრების ჯამისა, ხოლო არადიაგონალური ელემენტები აღნიშნავს ბმების ჯერადობებს ამ სტრუქტურულ ფრაგმენტებს შორის.

ამგვარად, ქვაზი-ანბ-მატრიცა ივება მოლეკულის გარკვეული სტრუქტურული მოდელის საფუძველზე (ეს უკანასკნელი შეირჩევა ამოცანის ქიმიური შინაარსის გათვალისწინებით) [7].

აღსანიშნავია, რომ ქვაზი-ანბ-მატრიცის დეტერმინანტის ათობითი ლოგარითმის მნიშვნელობა (lg(Δ_{ანბ})) წარმოადგენს ეფექტურ ტოპოლოგიურ ინდექსს (მოლეკულურ

დისკრიპტორს) „აღნაგობა-თვისებები” ტიპის კორელაციური განტოლებების ასაგებად. [4] ნაშრომში გამხსნელებად, გამოყენებულია ნაჯერი განუშტოებელი ერთატომიანი სპირტები (CH₃OH-დან C₅H₁₁OH-ის ჩათვლით). მათთვის შემუშავებულია უმარტივესი მოდელი:

$$R-X \quad (2)$$

სადაც, R = CH₃, C₂H₅, C₃H₇,...; X = OH.

(2) მოდელის შესაბამისად ქვაზი-ანბ-მატრიცას გააჩნია სახე:

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

ცხრილში მოცემულია ამ სპირტებისათვის ქვაზი-ანბ-მატრიცის დეტერმინანტის ათობითი ლოგარითმის მნიშვნელობები და Pb₄P⁺ იონის ძვრადობები (25⁰C-ზე) [4].

ცხრილი

| სპირტი (გამხსნელი) | CH ₃ OH | CH ₂ H ₅ OH | CH ₃ H ₇ OH | CH ₄ H ₉ OH | CH ₅ H ₁₁ OH |
|-----------------------------|--------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|
| lg(Δ _{ანბ}) | 2,18 | 2,46 | 2,63 | 2,75 | 2,84 |
| λ ₀ ⁺ | 44,54 | 29,42 | 10,90 | 8,88 | 3,82 |

კომპიუტერზე უმცირესი კვადრატების მეთოდის გამოყენებით, აგებულია კორელაციური განტოლება:

$$\lambda_0^+ = - 62,56 \lg(\Delta_{ანბ}) + 180,92 \quad (4)$$

აღმოჩნდა, რომ კორელაციის r კოეფიციენტი ტოლია 0.974. ამგვარად, ჯაფეს კრიტერიუმების მიხედვით, კორელაციები დამაკმაყოფილებელია [8].

მიღებული შედეგი გვიჩვენებს, რომ ამ ახალი მიდგომის გავრცელება შესაძლებელია სხვა, მსგავსი ტიპის (ერთი კლასის სხვადასხვა გამხსნელში) მიმდინარე პროცესებისათვისაც.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Rurvy P.R. Chemical Application of Topology and Graph Theory. Amsterdam, 1983.
2. გ. გამზიანი. მათემატიკური ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი., 1990.
3. გ. ლეკიშვილი, ლ. ასათიანი. მოლეკულური დისკრიპტორები ელემენტორგანულ ნაერთთა ქიმიაში. თბილისი, 1998.
4. Н.И. Пирцхалава, В.М. Центовский, З.И. Мачитадзе. Электропроводность хлорида, бромиды и иодида тетрафенилфосфония в спиртах. Сообщ АН ГССР, 1975, №3,с.62 1-624.
5. О. Оре. Теория графов. Москва, 1980.
6. M. Gverdsiteli, G. Gamziani, I. Gverdsiteli. The Contiguity Matrices of Molecular Graphs and their Modifications . Tbilisi, 1996.
7. Н.Н. Сидамонидзе, К.Т. Купатадзе, М.И. Гвердцители. Теоретическое исследование корреляции „структура-свойства“ в рамках методов ПНС-, квази- ПНС- и ЭП-матриц. Прикладная физика, 2009, №6, с. 36-39.
8. მ. გვერდწითელი. ფიზიკური ორგანული ქიმიის რჩეული თავები. თბილისი, 1982, გვ.19.

МАТЕМАТИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ Pb_4P^+ ИОНА В СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ

Н.О.Купатадзе, З.И.Мачаидзе, М.В.Бединашвили, М.И.Гвердцители
Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

В рамках метода квази-АНБ-матриц проведено математико-химическое исследование подвижности Pb_4P^+ иона в спиртовых растворах. Построено корреляционное уравнение. Корреляция удовлетворительна.

MATHEMATICAL-CHEMICAL INVESTIGATION OF THE MOBILITY OF Pb_4P^+ ION IN ALCOHOL SOLUTIONS

N.O.Kupatadze, Z.I.Machaidze, M.V.Bedinashvili, M.I.Gverdtsiteli
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Within the scope of quasi-ANB-matrices method mathematical-chemical investigation of the mobility of Pb_4P^+ ion in alcohol solutions was carried out. The correlation equation was constructed. Correlation is satisfactory.

მაკროციკლური აზომეთინური ნაერთების Cr^{3+} და Cu^{2+} კომპლექსების სინთეზი და მათი ბაქტერიციდული თვისებების შესწავლა

ნათია ოზიხიძე, თეა მათითაიშვილი, კახა დიდებულიძე, ელიზბარ ელიზბარაშვილი
საქართველოს აგრარული უნივერსიტეტი
e.elizbarashvili@agruni.edu.ge

ტეტრაჰიდროქსიბიფენილისა და მისი აზო ანალოგის საფუძვლზე მიღებულია მაკროციკლური აზომეთინური ნაერთების ქრომის (III) და სპილენძის (II) კომპლექსები. შესწავლილია მათი ანტიმიკრობული აქტივობა და დაგენილია, რომ არ ხასიათდებიან ბაქტერიციდული თვისებებით. შესაბამისად ისინი შესაძლებელია წარმატებით იქნას გამოყენებული ბაქტერიების ჟანგვის პროცესების მოდელირებისათვის.

შიფის ფუძეები და მათი კომპლექსები სხვადასხვა პოლივალენტურ მეტალებთან დიდი ხანია იპყრობს მკვლევართა ყურადღებას. მათ მიმართ ასეთი დაინტერესება განპირობებულია სამი ძირითადი ფაქტორით: მიღების მარტივი მეთოდით, ადვილად ხელმისაწვდომი ნედლეულითა და თვისებათა ფართო სპექტრით. აზომეთინების მიღება ძირითადად წარმოებს კარბონილური ნაერთების კონდენსაციით გააქტივებულ ამინებთან პოლარული გამხსნელის არეში 30-60 წუთის განმავლობაში სარეაქციო სისტემის დუღილის ტემპერატურაზე. პროდუქტი, როგორც წესი, მაღალი გამოსავლიანობით მიიღება [1]. ლიტერატურაში არაერთი წყარო მოიძიება, რომლის თანახმადაც შიფის ფუძეებს გააჩნიათ ფოტოქრომი და ლუმინესცენტური თვისებები [2]. ტექნიკასა და ინდუსტრიაში ისინი უკვე გამოიყენებიან ლუმინესცენტურ ნათურებში, ფუნგიციდებად. გარდა ამისა, უკანასკნელ წლებში მათმა მეტალ კომპლექსებმა ფართი გამოყენება ჰპოვეს როგორც დამუხრეველებმა და ჟანგბადის ტრანსპორტიორებმა ბიოლოგიური სისტემების მოდელირებაში [3]. მაგრამ აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ლიტერატურაში აღწერილი აზომეთინები ძირითადად წარმოადგენენ ღია ჯაჭვიან ნაერთებს ან ხუთწევრიან ციკლურ სისტემებს, კერძოდ კი ოქსაზოლის ნაწარმებს. უფრო დიდი ზომის ციკლურ აზომეთინებზე ინფორმაცია ძალიან მწირია.

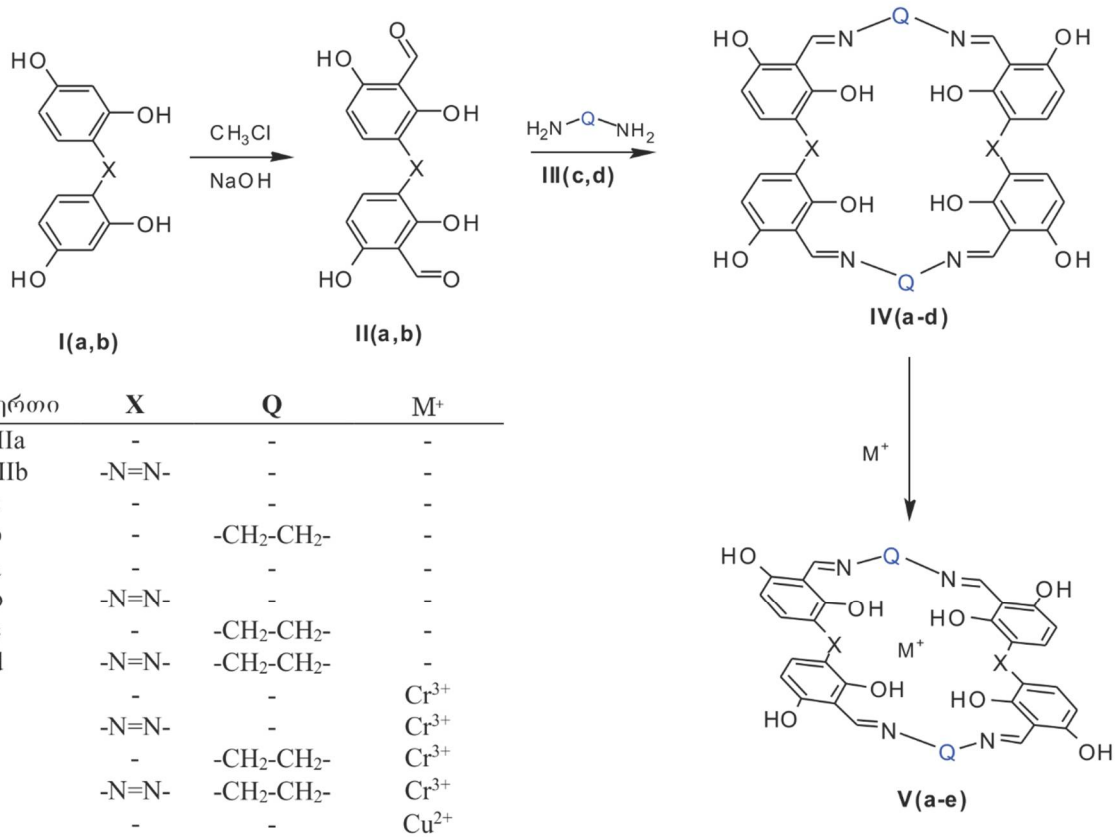
მაკროციკლური აზომეთინის სინთეზის ერთ-ერთი პირველი მცდელობა წარმატებით იქნა შესრულებული რამდენიმე წლის წინ ჩვენი სამეცნიერო ჯგუფის მიერ [4]. მისი თვისებების შესწავლისას აღმოჩნდა, რომ იგი ხასიათდებოდა მაღალი კომპლექსწარმოქმნის უნარითა და ტეტრაკისაზონაერთის წარმოქმნის შესაძლებლობით, რაც თავის მხრივ უნიკალურია აზოპარტნიორისათვის აზომეულლების რეაქციაში. ჩვენი კვლევის მიზანს წარმოადგენს მაკროციკლური აზომეთინების გამოყენების შესაძლებლობა ჟანგბადის ტრანსპორტიორებად ბიოლოგიური ჟანგვის სისტემების მოდელირებისას. ამდენად, კვლევის პირველ ეტაპზე მიზანშეწონილად ჩავთვალეთ მისი ბიოლოგიური აქტიურობის შესწავლა. წინამდებარე ნაშრომში წარმოვადგენთ ზოგიერთი სინთეზირებული მაკროციკლური აზომეთინების ბაქტერიციდული თვისებების შესწავლის შედეგებს.

შედეგების ბანჯა

მიზნობრივი მაკროციკლური აზომეთინების კომპლექსნაერთების სინთეზისათვის საწყის ნაერთებად აღებული იქნა 2,4,2',4'-ტეტრაჰიდროქსიბიფენილი (Ia) და (E)-4,4'-(დიაზენ-1,2-დიილ)ბის(ბენზოლ-1,3-დიოლი) (Ib). მათი კარბონილურება რეიმან-ტიმანის მეთოდით ქლოროფორმით ტუტის თანაობისას იზოპროპილის არეში იძლევა შესაბამის დიკარბონილ ნაწარმებს (IIa,b). მიღებული პროდუქტებში აღდებულის ჯგუფის ჩანაცვლება მოწმდებოდა თხელ-ფენოვანი ქრომატოგრაფიის მეთოდითა ქიმიური ანალიზით (ვერცხლის სარკის რეაქცია). როგორც წესი, რეაქციის პირველ საფეხურზე მიიღება მონო- და დიკარბონილ ნაწარმების ნარევი პირველის დომინანტური შემცველობით. მიღებული ნედლი პროდუქტის ანალოგიურ პირობებში განმეორებითი კარბონილურებას კი მივყავართ მიზნობრივ IIa და IIb-ს რაოდენობრივ წარმოქმნასთან.

რეაქციის შემდეგ საფეხურს წარმოადგენს კონდენსაციის რეაქცია ახლად სინთეზირებულ ჰიდრაზინ ჰიდრატთან (IIa) ან ეთილენ დიამინთან (IIb) აცეტონიტრილის ან მეთანოლის არეში

სუსტი მჟავა კატალიზით ძლიერი განზავების პირობებში. სარეაქციო სისტემიდან გამოლექილი პროდუქტების (IIIa-d) გაფილტვრის, გადაკრისტალებისა და გაშრობის შემდეგ გამოყენებული იქნა მიზნობრივი კომპლექსების მისაღებად. კომპლექსების სინთეზი წარმოებდა IIIa-d-ს მეთანოლურ ხსნარში ქრომი (III) ქლორიდისა და სპილენძის დიქლორიდის ხსნარის დამატებით pH 7-7.5 პირობებში. კომპლექსების ფორმირებას ესაჭიროებოდა 5-10 საათიანი დუღილი, რომლის დროსაც მიზნობრივ IVa-e გამოიყოფოდა ვაკუუმში გამსხნელის მოცილებით (იხ. სქემა).



სქემა: მაკროციკლური აზომეთინებისა და მათი მეტალ კომპლექსების სინთეზი

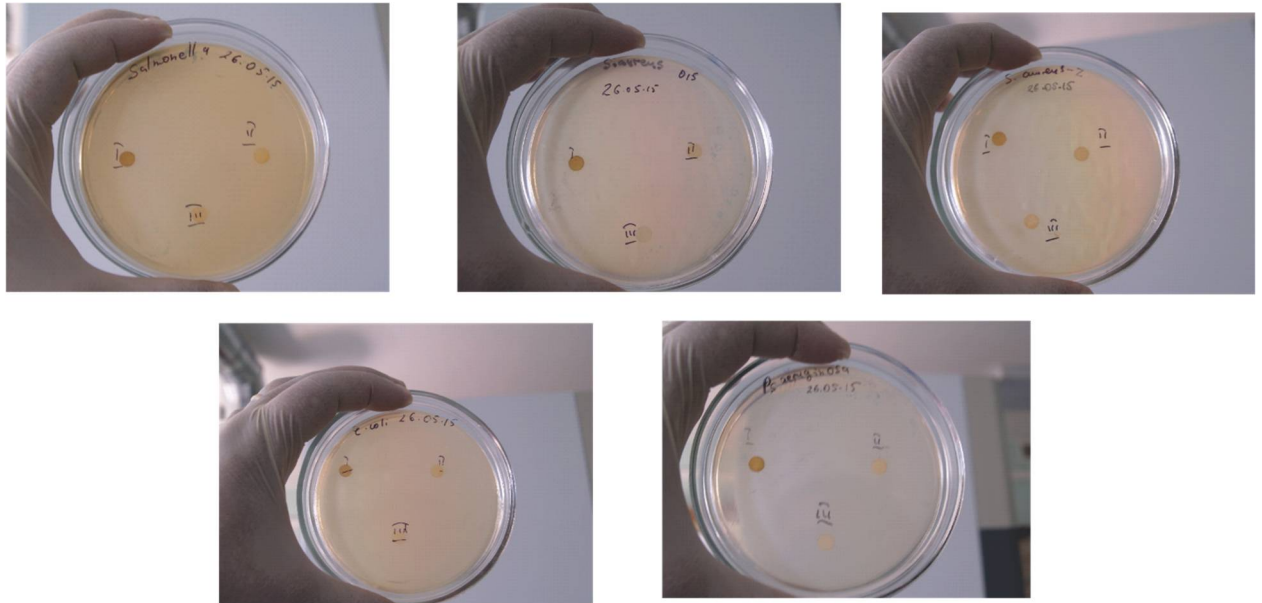
სინთეზირებული შიფის ფუძეების ქრომისა და სპილენძის კომპლექსების ბიოლოგიური აქტიურობის შესასწავლად ჩატარებული იქნა მათი სკრინინგი. კერძოდ შესწავლილი იქნა ბაქტერიციდული თვისებები პათოგენების *Salmonella Enteritidis*, *E.Coli*, *Pseudomona Aeruginosa*, *Strephylo-coccus Aureus*, *Strephylococcus O15*. მიმართ ქაღალდის დისკოების დიფუზიის მეთოდის გამოყენებით [5].

3 მმ დიამეტრის ფილტრის ქაღალდისაგან დამზადებულ დისკოებზე დავაწვეთეთ მაკროციკლური აზომეთინების კოლმპექსნაერთების დიმეთილფორმამიდის განზავებული ხსნარები (0.3 მგ/მლ) მიკროპიპეტის საშუალებით. დისკოებს გასაშრობად ვათავსებდით 48 საათის განმავლობაში 37°C-ზე ვაკუუმ საშრობ კარადაში, ხოლო შემდეგ გადაგვქონდა აგარით დაფარულ პეტრის ჯამებზე. ბაქტერიების გასაზრდელად გამოყენებული იყო აგარის სტანდარტული ნიადაგი. მის მცირე რაოდენობას ვათავსებდით (დაახლოებით 50 გ) 1 ლიტრ ახლად გამოხდილ წყალში და ვაყოვნებდით 15 წუთს ოთახის ტემპერატურაზე, ხოლო შემდეგ მღუღარე წყლის აბაზანაში აგარის სრულ გახსნამდე.

აგარის ფირების მოსამზადებლად ნარევეს წინასწარ ვათავსებდით 120°C-ზე 15 წუთით ავტოკლავში და გადაგვქონდა წინასწარ გარეცხილ და სტერილიზებულ პეტრის ჯამებზე.

ინოკულაცია ჩატარებული იქნა პლატინის მავთულის ყულფებით, რომელსაც წითელ ნათებად ვაცხელებდით სპირტქურის ალში, ვაცივებდით და შემდეგ ვიყენებდით ბაქტერიული დალაქავებისათვის. შემდეგ წინასწარ მომზადებულ ფილტრის ქაღალდის დისკოებს სტერილური პინცეტის საშუალებით

დაგეგმონდა აგარის ფირზე და ვახდენდით 37°C-ზე 24 საათის განმავლობაში ინკუბირებას. 24 საათის შემდეგ ვზომავდით იზიბირების დიაპაზონს (დიამეტრს) დისკოს გარშემო (იხ. სურ.).



სურათი: შიფის ფუძეების ქრომ(III)ისა და სპილენძ(II)ის კომპლექსების ბაქტერიციდული თვისებების შესწავლა ქალაქის დისკოების დიფუზიის მეთოდის გამოყენებით

შიფის ფუძეების კომპლექსების ბაქტერიციდული ანალიზის შედეგები მოცემულია ცხრილში. ინჰიბირების ზონად გამოყენებული იყო სტანდარტი: ინჰიბირების ზონის დიამეტრი (მმ, ინჰიბირების %): +, 6-10 (27-45%); ++, 10-14 (45-64%); + + +, 14-18(64-82%); + + + +, 18-22 (82-100%).

ცხრილი: შიფის ფუძეების ქრომისა და სპილენძის კომპლექსების ბაქტერიციდული თვისებები

| № | ნაერთი | <i>Salmonella Enteritidis</i> | <i>E.Coli</i> | <i>Pseudomona Aeruginosa</i> | <i>Streptilyococcus Aureus</i> | <i>Streptilyococcus O15-</i> |
|---|--------|-------------------------------|---------------|------------------------------|--------------------------------|------------------------------|
| 1 | Va | - | - | - | - | - |
| 2 | Vb | - | - | - | - | - |
| 3 | Vc | - | - | - | - | - |
| 4 | Vd | - | - | - | - | + |
| 5 | Ve | - | - | - | - | - |

როგორც ცხრილში მოყვანილი მონაცემებიდან ჩანს, ნაერთები Va-e პრაქტიკულად არ ავლენენ ანტიბაქტერიულ აქტივობას, მხოლოდ Vd ნაერთისათვის შეინიშნება სუსტი აქტივობა *Streptilyococcus O15-*ის მიმართ.

ამრიგად, ტეტრაჰიდროქსიბენზილისა და მისი აზო ანალოგის საფუძველზე მიღებული მაკროციკლური აზომეთინური ნაერთების ქრომის (III) და სპილენძის (II) კომპლექსები არ ხასიათდებიან ბაქტერიციდული თვისებებით, და შესაბამისად ისინი შესაძლებელია წარმატებით იქნას გამოყენებული ბაქტერიების ჟანგვის პროცესების მოდელირებისათვის.

მადლიერება.

სამუშაო შესრულებულია შოთა რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის დაფინანსებით (გრანტი FR/177/6-420/13)

ლიტერატურა–REFERENCES–ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Longmire, B. Wang, X. Zhang. Highly Enantioselective Ag(I)-Catalyzed [3 + 2] Cycloaddition of Azomethine Ylides. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, 124 (45), 13400.
2. M. Nonoyama. 2 Bivalent metal complexes of phototropic N-(2-pyridylmethyleneamino)-2-pyridinecarboxamide. *Inorganica Chimica Acta*. 1974, 10, 133.
3. Z. H. Chohan, S. H. Sumrra, M. H. Youssoufi, T. B. Hadda. Metal based biologically active compounds: Design, synthesis, and antibacterial/antifungal/cytotoxic properties of triazole-derived Schiff bases and their oxovanadium(IV) complexes. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2010, 45, 2739.
4. E. Elizbarashvili, T. Matitaishvili, Kh. Topuria. Synthesis of Macrocyclic Polyazomethines. *Journal of Brazilian Chemical Society*. 2007, 18, 6, 1254.2
5. Z. Chochan, M. Praveen, Synthesis, characterization and antibacterial properties of symmetric 1,1'-ferrocene derived Schiff-base ligands and their Co(II), Cu(II), Ni(II) and Zn(II) chelates. *Appl. Organomet. Chem.* 13, 376 (2000).

SYNTHESIS OF Cr³⁺ AND Cu²⁺ CONTAINING COMPLEXES OF MACROCYCLIC AZOMETHINES AND INVESTIGATION OF THEIR ANTIMICROBIAL ACTIVITY

N.Ochkhikidze, T.Matitaishvili, K.Didebulidze, E.Elizbarashvili
Agricultural University of Georgia

SUMMARY

It has been synthesized chromium (3+) and copper (2+) complexes of macrocyclic azomethines obtained from tetrahydroxybiphenyl and its azo analogue. The screening of biological activity was performed and it has been found that they are not characterizing with antimicrobial activity. Therefore, these complexes may be successfully used as a dioxygen carriers in the modelling of oxidation processes of microorganisms.

СИНТЕЗ Cr³⁺ и Cu²⁺ СОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ АЗОМЕТИНОВЫХ СОЕДИНЕНИИ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ПРОТИВОМИКРОБНЫХ СВОЙСТВ

Н.Т.Очхикидзе, Т.Р.Матитаишвили, К.А.Дидебулидзе, Э.Н.Элизбарашвили
Аграрный университет Грузии

РЕЗЮМЕ

Синтезированы комплексные соединения Cr(3+) и Cu(2+) макроциклических азометинов, полученных из тетрагидроксибифенила и его азо аналога. Изучено их биологическое активность и обнаружено, что они не характеризуются противомикробными свойствами и возможно их использование для переноса кислорода при моделировании окислительных процессов микроорганизмов.

მაღალმოლეკულურ ნაერთთა ქიმია

პოლიმერების ცოცვადობა წყალხსნარებში დიფუზიური შეზღუდვის არარსებობის პირობებში

ა. ფორჩხიძე

აკაკიწერეთის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

იმის დასადგენად, თუ რომელი პროცესი ლიმიტირებს პოლიმერების ცოცვადობის საერთო სიჩქარეს წყალხსნარებში, ჩატარებული იქნა ექსპერიმენტები. დადგენილია, რომ პოლიმერების თხელი აპკების ცოცვადობის საერთო სიჩქარეს თხევად არეებში ლიმიტირებს წყლის დიფუზიით გამოწვეული პროცესები პოლიმერებში.

პოლიმერებში წყლის დიფუზია წარმოადგენს ფართო კვლევის საგანს. მაგ. პოლიეთილენტერეფტალატი, პოლიეთილენში და პოლიკაპროამიდი წყლის დიფუზიის მონაცემები მოყვანილია ნაშრომში [1, გვ. 259].

თუ პოლიმერში სითხის დიფუზიის სიჩქარე მეტია, ვიდრე პოლიმერის ჰაერზე ცოცვადობის სიჩქარე, ასეთ შემთხვევებში სითხე სწრაფად შეავსებს მისაწვდომ უბნებს პოლიმერის მატრიცაში და ადგილი ექნება სითხით გაჯერებული პოლიმერის ცოცვადობას.

ასეთი პირობა სრულდება პოლიმერების უმრავლესობის თხელი აპკებისათვის წყალში.

განვიხილავთ წყლის დიფუზიის კანონზომიერებებს გამოკვლეულ პოლიმერებში.

ცხრილში 1 მოყვანილია პოლიმერებში წყლის დიფუზიის კოეფიციენტების მნიშვნელობები.

ცხრილი 1. პოლიმერებში წყლის დიფუზიის კოეფიციენტების მნიშვნელობა 25 °C

| პოლიმერი | $D_{c=0}=10^9 \text{სმ}^2/\text{წმ}$ | E, კკალ/მოლი |
|--|--------------------------------------|--------------|
| პოლიეთილენტერეფტალატი | 3,9 | 10,4 |
| პოლიეთილენიმაღალიწნევის ($\rho=0,922$) | 230 | 14,2 |
| პოლიკაპროამიდი | 1 | 6,5 |

პოლიკაპროამიდისათვის ექსპერიმენტებით განსაზღვრული D_{H_2O} -ს მნიშვნელობა დამოკიდებულია პოლიმერში წყლის კონცენტრაციაზე [2], და ზღვრული სორბციის ტოლი წყლის კონცენტრაციის დროს $D_{H_2O}=3 \cdot 10^{-8} \text{სმ}^2/\text{წმ}$. პოლიეთილენტერეფტალატისა და პოლიეთილენისათვის D_{H_2O} -ს მნიშვნელობები არ არის დამოკიდებული წყლის კონცენტრაციაზე პოლიმერებში. პოლიარიატ Φ-2-ის წყლის დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობა არ იყო ცნობილი ლიტერატურაში და განსაზღვრული იქნა ჩვენს მიერ.

D_{H_2O} -ს მნიშვნელობა გამოითვლებოდა პოლიარიატ Φ-2-ის წყალში სორბციის შედეგად მიღებული მრუდებისგან (სურ.1) განტოლებით:

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - \frac{8}{\pi^2} \exp\left(-\frac{\pi^2 D t}{\ell^2}\right) \quad (1)$$

სადაც ℓ -აპკის სისქა, M_t და M_∞ - აპკის მიერ სორბირებული წყლის მიმდინარე და ზღვრული კონცენტრაციებია შესაბამისად.

ცხრილი 2. წყლის დიფუზიის კოეფიციენტების მნიშვნელობა პოლიარიატ Φ-2-ში წყლის ორთქლის სხვადასხვა ფარდობითი წნევებისათვის 25 °C-ზე.

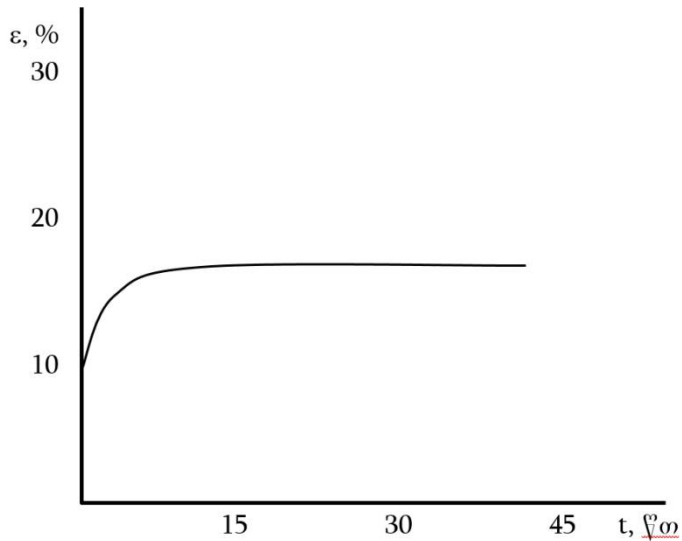
| P/P ₀ | 0.14 | 0.28 | 0.43 | 0.75 |
|---------------------------------------|----------|----------|----------|----------|
| $D_{H_2O}=10^9 \text{სმ}^2/\text{წმ}$ | 4,4 ±0,2 | 4,6 ±0,3 | 4,4 ±0,2 | 4,0 ±0,2 |

D_{H_2O} -ს საშუალო მნიშვნელობა ტოლია $(4,4 \pm 0,2) \cdot 10^{-8} \text{სმ}^2/\text{წმ}$.

ცნობილია, რომ პოლიმერში სორბციის პროცესის დამთავრების დრო (τ_{H_2O}) შეიძლება აღწერილი იქნას განტოლების

$$\tau_{H_2O} = -\frac{\ell^2}{6D_{H_2O}} \quad (2)$$

მიხედვით, სადაც ℓ -ნიმუშის სისქა.



სურ. 1. პოლიაკრილატ-2-ის ცოცვადობის მრუდები წყალში T=25°C.

მე-3 ცხრილში მოცემულია τ_{H₂O}-ს ნიშვნელობები შესწავლილი პოლიმერების აპკებისათვის.

ცხრილი 3. τ_{H₂O}-ს ნიშვნელობები სხვადასხვა პოლიმერების აპკებისთვის 25 °C-ზე.

| პოლიმერი | ℓ·10 ³ სმ | τ _{H₂O} , წმ |
|---------------------------|----------------------|----------------------------------|
| პოლიეთილენტერეფტალატი | 1 | 40 |
| მაღალი წნევის პოლიეთილენი | 5 | 20 |
| პოლიკაპროამიდი | 2,2 | 30 |
| პოლიაკრილატ-2 | 2,2 | 20 |

ჩატარებული ექსპერიმენტები აჩვენებენ, რომ პოლიმერების თხელი აპკების ცოცვადობის საერთო სიჩქარეს თხევად არეებში ლიმიტირებს პოლიმერებში წყლის დიფუზიით გამოწვეული პროცესები.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Barric J.A. water in polymer in Diffusion in polymere, Ed. Grahk J., Parte G.S. London, N.Y., Academic Press, 1968, p. 452.
2. Андрианова Г.П., Чалих А.Е., Лебедева В.Н. Кинетика Сорбции и диффузии воды в полимерах. "Высокомолек. соед." 1979 (Б). Т.21. Б.5. с. 386-391.

THE POLYMERS CREEPING IN THE WATER SOLUTIONS DURING THE DIFFUSION RESTRICTION ABSENCE

A.Porchkhidze
A.Tsereteli State University

SUMMARY

To find out, which process limits in the polymers creeping whole speed water solutions was done the experiments. Is determined that, the polymers thin films creeping whole speed is restricted by water diffusion processes in the water liquid area in the polymers.

ПОЛЗУЧЕСТЬ ПОЛИМЕРОВ В ВОДНЫХ СРЕДАХ В УСЛОВИЯХ ОТСУТСТВИЯ ДИФУЗИОННЫХ ОГРАНИЧЕНИИ

А.Порчхидзе
Государственный университет Акакия Церетели

РЕЗЮМЕ

С целью установления, какой процесс лимитирует общую скорость ползучести полимеров в жидких средах были проведены эксперименты. Установлено, что общую скорость ползучести тонких пленок полимеров в жидких средах лимитируют процессы протекающие диффузией водой в полимерах.

ზოგიერთი მოსაზრება მილსადენის ნარჩენის გამოყენების სფეროების შესახებ

გურამ ხიტირი, თინათინ გაბუნია, ზურაბ ამირიძე
 ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
 პეტრე მელიქიშვილის სახელობის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი

საქართველოს ტერიტორიას კვეთს თბილისი-ბაქო-ჯეიჰანის ნავთობსადენი, რომლის გამტარუნარიანობა ყოველწლიურად იზრდება.

ნავთობსადენის ექსპლოატაციისას ჩნდება პრობლემა – გროვდება დიდი რაოდენობით ნარჩენი მასა, რომელიც ნავთობის ტრანსპორტირებისას ილექება მილსადენის კედლებზე. გარკვეული პერიოდულობით ტარდება მილსადენის გაწმენდითი სამუშაოები, რათა აღდგენილ იქნას მილსადენის გამტარუნარიანობა. წლიდან წლამდე ნარჩენის მასა მუდმივად იზრდება და გროვდება გამოუყენებელი ნარჩენის სახით.

ეკოლოგიური მოსაზრებებით დადგა ნავთობის მილსადენის ნარჩენი მასის შესწავლის აუცილებლობა მისი შემდგომი გადამუშავებისა და გამოყენების გზების დასახვის მიმართულებით. საჭიროა ამ იაფი ნედლეულის უტილიზაციისათვის ეფექტური მეთოდების მოძიება და შემუშავება.

ჩვენ შევისწავლეთ ნავთობსადენის ნარჩენის ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები. დადგინდა, რომ ეს არის პერსპექტიული ნედლეული მცირეტონაჟიანი და დეფიციტური პროდუქტების მისაღებად. ნარჩენის რექტიფიკაცია ჩატარდა საწარმოო ტიპის დანადგარზე APH-2.

ნავთობსადენის ნარჩენი წარმოადგენს ნახევრად მყარ ამორფულ მასას. აუცილებელი გაუწყობების შემდეგ ხდება მისი გაცხელება გაღობამდე. მიღებული შავი ფერის ბლანტი სითხე თავსდება დისტილატორის კუბში და ცხელდება 80–55°C ტემპერატურის და 1 ატმ – 10⁻³ მმ ვერცხლ.წყ.სვ. წნევის პირობებში. რექტიფიკაციის შედეგად შეგროვდა შემდეგი ვიწრო ფრაქციები: 80–120°C, 120–150°C, 150–190°C, 190–250°C, 250–300°C, 300–350°C, 350–400°C, 400–450°C. პრაქტიკული მოსაზრებით მოხდა რამდენიმე ფრაქციის გაერთიანება და საბოლოოდ მივიღეთ შემდეგი საკვლევი ფრაქციები: I - 80–190°C (გაერთიანდა ორი ფრაქცია), II - 190–300°C(გაერთიანდა ორი ფრაქცია), III - 300–350°C (არ გაერთიანდა), IV- 350–450°C(გაერთიანდა ორი ფრაქცია). ანუ მივიღეთ ოთხი ძირითადი ფრაქცია და ნარჩენი >450°C [1]. გამოყოფილი ფრაქციების ძირითადი მახასიათებლები მოტანილია ცხრილში 1.

კვლევისას აღმოჩნდა, რომ IV ფრაქციაში პარაფინების შემცველობა არის მაქსიმალური (70%). ამრიგად, მილსადენის ნარჩენი შეიძლება განვიხილოთ, როგორც პარაფინების (ცერეზინების) იაფი წყარო. ნავთობსადენის ნარჩენის რაოდენობა კი ყოველწლიურად იზრდება და პრაქტიკულად გამოუყენებელი რჩება [2].

პარაფინების გამოყენების სფერო კი საკმაოდ მრავალფეროვანია. ისინი გამოიყენება ელექტროტექნიკური, პარფიუმერულ-კოსმეტიკური, სამედიცინო და სხვა მრავალი მიზნებისათვის. თვალსაჩინოებისთვის, მაგალითად: 1) სანთლები განათებისათვის (დეკორატიული, საშობაო-საახალწლო და საეკლესიო); 2) ყინვაგამძლე შესაფუთი მასალები საკვები პროდუქტებისათვის; 3) პროდუქტების შესანახი ან გადასატანი კონტეინერების მასალის ერთ-ერთი კომპონენტი; 4) კოსმეტიკური ვაზელინი; 5) სამედიცინო მიზნებისათვის – პარაფინოთერაპია, პარაფინის ნიღბების დამზადება; 6) საყოფაცხოვრებო მასტიკა, ასევე ბიტუმი-პოლიმერული მასტიკა დიდ საწარმოო კონსტრუქციებში ბზარებისა და ნაკვდევების დასაფარად.

ცხრილი 1. ნავთობსადენის ნარჩენის რექტიფიკაციით მიღებული ფრაქციების ძირითადი მახასიათებლები

| რაქცია | სიმკვრივე ρ | ლ. ტემპ. °C | ფოთქვის ტემპ. °C | გოგირდის შემცველობა % | პარაფინები % | ფისები და ასფალტენები % | არომატუკა % | ამოსავლი-ანობა % |
|---------|-------------|-------------|------------------|-----------------------|--------------|-------------------------|-------------|------------------|
| I | 0,8158 | -10 | 62 | 0,02 | – | – | – | 12 |
| II | 0,8519 | 1 | 115 | 0,04 | 25 | 30 | 1,5 | 14 |
| III | 0,8830 | 18 | 168 | 0,06 | 35 | 10 | 12 | 10 |
| IV | 0,8890 | 55 | 178 | 0,08 | 70 | 15 | 25 | 23 |
| ნარჩენი | 0,9600 | 85 | 250 | 0,17 | 35 | 25 | 30 | 40 |

პარაფინი არსებობს სუფთა და მალალი სისუფთავის. № 23683-89 სახსტანდარტის მიხედვით პარაფინის მარკებია T-1, T-2, T-3. ისინი გამოიყენება ტექნიკური დანიშნულებისათვის, ასევე საყოფაცხოვრებო ქიმიასში ქაღალდის ან ხის ზედაპირების გასაქულებლად. აქტიურად გამოიყენება სხვადასხვა დანიშნულების სანთლების დასამზადებლად.

საეკლესიო დანიშნულების სანთლებისათვის საჭირო პარაფინს უნდა ჰქონდეს მალალი ლღობის ტემპერატურა. ზოგადად პარაფინების ლღობის ტემპერატურაა 65-67⁰C. ჩვენი ექსპერიმენტისას გამოყოფილი და გასუფთავებული პარაფინის ლღ. ტემპ. საკმაოდ მალალია და აღწევს 85⁰C. ეს არის იდეალური პარაფინი სანთლების დასამზადებლად.

ლიტერატურაში მოძებნილ მასალაზე დაყრდნობით აღმოჩნდა, რომ თუ პარაფინს დაემატება პოლიმერული დანამატი (მალალი სიმკვრივის პოლიოლფენები), სანთელი გახდება უფრო თბომედეგი და მდგრადი (არ ჩამოიღვენთება), ამასთან იზრდება სანთლის წვის ხანგრძლივობა. დანამატის შეყვანა საჭიროა მცირე რაოდენობით. პარაფინის 100 მასურ წილზე პოლიეთილენი და/ან პოლიპროპილენი 0,005-2,0 მას.წილი. პოლიმერულ დანამატში პოლიეთილენისა და პოლიპროპილენის თანაფარდობა 1:104 – 104:1 ზღვრებშია [3].

პარაფინებსა და მოწოდებულ დანამატებს აქვთ ერთნაირი პოლიოლფენური ბუნება, რაც განსაზღვრავს ნარევის კომპონენტების თერმოდინამიკურ შესაბამისობას და ნარევის მალალ თერმოდინამიკურ მდგრადობას. ეს კი განაპირობებს სანთლების საიმედო საექსპლუატაციო თვისებებს და მდგრადობას შენახვისას.

პოლიმერული დანამატის სახით შეიძლება გამოყენებულ იქნეს ისეთი მყარი საყოფაცხოვრებო ნარჩენები, როგორცაა, მაგალითად, გამოყენებული ერთჯერადი შპრიცები ან საქსოვი-საკერავი ძაფის დაცარიელებული მასრები. ამ მასალის გამოყენებით შეიძლება გადაიჭრას კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი ეკოლოგიური პრობლემა – ბუნებრივი გზით არადარდაქმნადი მყარი ნარჩენების ათვისება და უტილიზაცია.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. G.Khitiri, I. Chikvaidze, T.Gabunia, M.Tsurtsunia Study and wasteless utilization of the residue after profilaxis of oil pipeline. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მოამბე, ტ.9, № 3, 2015, გვ. 103-106.
2. Паренаго О.П., Давидова С.Л. Экологические проблемы химии нефти (обзор). Нефтехимия, 1999, т. 39, № 1, с. 3-13.
3. Патент Японии, з. № 62-33280, кл. С 11 С 5/00, опубл. 07.20.87.

НЕКОТОРЫЕ СООБРАЖЕНИЯ ПО ПРИМЕНЕНИЮ ОСТАТКОВ НЕФТЕПРОВОДА

Г.Ш.Хитири, Т.И.Габуня, З.С.Амиридзе
Тбилисский государственный университет им. Ив. Джавахишвили
Институт физической и органической химии П. Меликишвили

РЕЗЮМЕ

Показана целесообразность использования остатков нефтепровода для получения полезных продуктов промышленного назначения и для решения экологических вопросов.

SOME CONSIDERATIONS ABOUT UTILIZATION OF PIPELINE RESIDUE

Guram Khitiri, Tinatin Gabunia, Zurab Amiridze
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University
Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry

SUMMARY

Appropriateness of utilization of pipeline residue for obtaining of useful products for industrial purposes and for resolving of ecological problems.

2-β-D-გლუკოპირანოზილ-α-D-მანოპირანოზის სინთეზი

ნათია შენგელია, ლალი ტაბატაძე, ზურაბ ფაჩულია, რამაზ გახოკიძე*

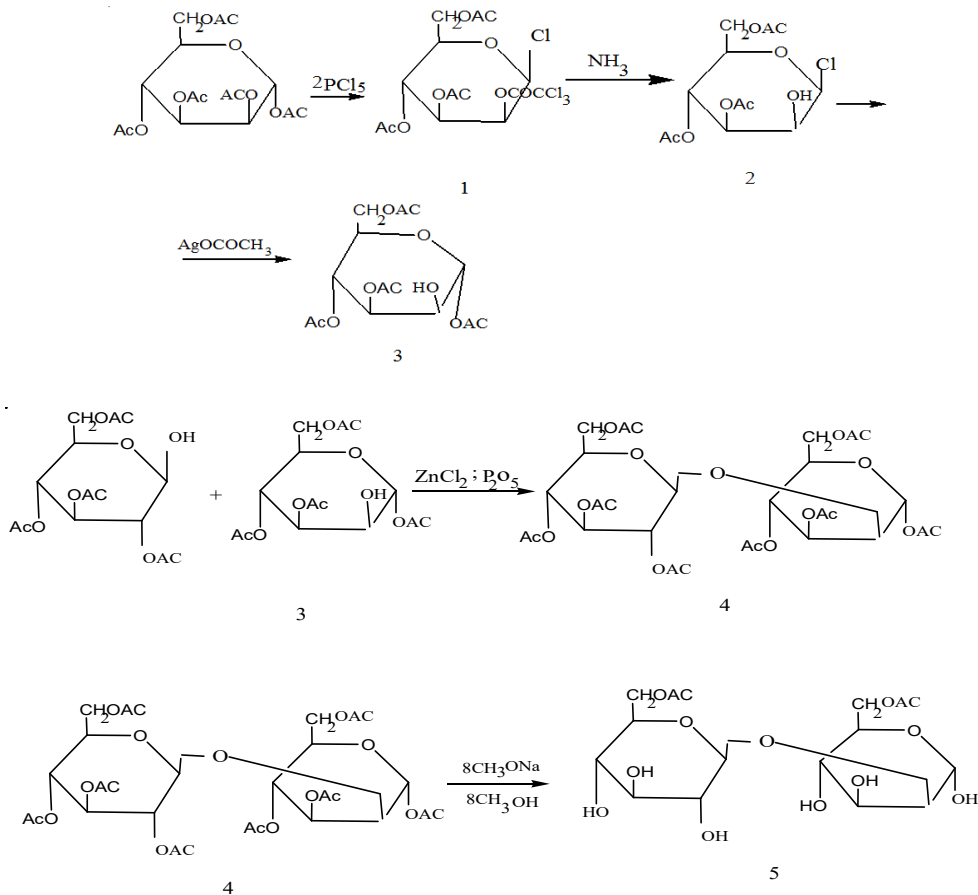
სოხუმის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

*ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ჩვენ მიერ სინთეზირებულია 2-β-D-გლუკოპირანოზილ-α-D-მანოპირანოზა 2,3,4,6-ტეტრა-O-აცეტილ-გლუკოპირანოზის კონდენსაციით 1,3,4,6-ტეტრა-O-აცეტილ-D-მანოპირანოზასთან თუთიის და კალის ქლორიდების და ფოსფორის (V) ოქსიდის თანდასწრებით და აცეტოქსიჯგუფების შემდგომი ჰიდროლიზით.

დღეისათვის ყველა ცნობილ დისაქარიდს აქვს ტრეპალოზის, მალტოზის, გენციობიოზის მსგავსი აგებულება, სადაც ბიოზური ბმა ხორციელდება მონოსაქარიდების 1-1, 1-4 და 1-6 ნახშირბადის ატომებს შორის [1-3]. რაც შეეხება ახალი ტიპის 1-2 და 1-3 ბმების შემცველი დისაქარიდების (სოფოროზა, ლამინარიბიოზა) არსებობის შესაძლებლობა და სინთეზის მეთოდები დაამუშავა პროფ. ა. გახოკიძემ [4-7], რომელიც გახოკიძის სინთეზის სახელწოდებითაა ცნობილი.

წარმოდგენილ ნაშრომში განხილულია გლუკოზიდ-2-მანოზის სინთეზი. საწყის ნივთიერებას წარმოადგენს 2,3,4,6-ტეტრა-O-აცეტილგლუკოპირანოზა(4) და 1,3,4,6-ტეტრა-O-აცეტილმანოპირანოზა(3). ქლოროფორმის ხსნარში მორეაგირე ნივთიერებებიდან თუთიის და კალის ქლორიდების და ფოსფორის ანჰიდრიდის თანდასწრებით მიიღება 2-β-D-გლუკოპირანოზილ-α-D-მანოპირანოზის ოქტააცეტატი (5). უნდა აღინიშნოს, რომ საწყისი ნივთიერებების კონდენსაცია დადებით შედეგს იმ შემთხვევაში იძლევა, როდესაც წყალწარმოვევ კატალიზატორებს (ZnCl₂, P₂O₅) ემატება მცირე რაოდენობით SnCl₂, რაც განაპირობებს ტეტრააცეტილგლუკოზის წარმოქმნას, რომელიც შემდეგ α-ტეტრააცეტილმანოზასთან კონდენსაციით იძლევა α-ოქტააცეტატს.



ექსპერიმენტული ნაწილი

1-ქლორ-2-ტრიქლორაცეტილ-3,4,6-ტრიაცეტილ-მანოპირანოზა (1). ხსნარი, რომელიც შეიცავს 10გ მანოპირანოზისპენტააქეტატს და 20გ PCl_5 ათავსებენ მრგვალი კოლბაში უკუმაცივართან ერთად ქლორკალციუმიანი მილით და კოლბას აცხელებენ წყლის აბაზანაზე 5-6 საათის განმავლობაში 80-90°C T-ზე. წარმოიქმნება ერთგვაროვანი მოყვითალო ხსნარი. გაცივების შემდეგ სარეაქციო მასიდან შემცირებულ ვაკუუმზე 50°C T-ზე გადადენიან აცეტილქლორიდსა და სამქლორიანფოსფორს. კოლბაში დარჩენილ პროდუქტს ხსნიან 100 მლ ამილის სპირტში, რომლიდანაც გაცივების შემდეგ გამოყოფილი კრისტალური პროდუქტის ექსტრაგირება ხდება ეთერით. გაშრობის და ეთერის აორთქლების შემდეგ წარმოიქმნა 1-ქლორ-2-ტრიქლორაცეტილ-3,4,6-ტრიაცეტილმანოპირანოზის კრისტალები, რომელსაც აკრისტალებენ მეთანოლიდან. მიიღება 7გ (58,08%) სუფთა ნივთიერება.

T_{ლ.} 134-136°C. იხსნება ბენზოლში, ქლოროფორმში, ეთერში, ეთილაცეტატში. აღადგენს ფელინგის სითხეს და ვერცხლის ნიტრატთან იძლევა ვერცხლის ქლორიდის ნალექს. $[\alpha]_D^{18} + 16,2^\circ$ (ქლოროფორმი). $M(C_{14}H_{16}O_9Cl_4) = 470$. ნაპოვნია %: C 34,8; Cl 29,89. გამოთვლილია %: C 35,74; H 3,40; Cl 30,21. Rf 0,48 (ქლოროფორმი:მეთანოლი 19:5).

1-ქლორ-3,4,6-ტრიაცეტილმანოპირანოზა(2). 6გ 1-ქლორ-2-ტრიქლორაცეტილ-3,4,6-ტრიაცეტილ-მანოპირანოზას (1) უმატებენ 0°C T-ზე მშრალი ამიაკით გაჯერებულ 100 მლ აბსოლუტურ ეთერს. ხუთწუთიანი ნჯღრევის შემდეგ ნივთიერება (1) მთლიანად იხსნება. რამდენიმე საათის შემდეგ იწყება კრისტალიზაცია. პროდუქტს აკრისტალებენ ეთანოლიდან. მიიღება 4,8 გ (115%) სუფთა კრისტალები. T_{ლ.} 151-152°C. $[\alpha]_D^{20} + 17,1^\circ$ (ეთილაცეტატი). იხსნება ეთერში, აცეტონში, ქლოროფორმში, ეთანოლში. გაცხელებისას აღადგენს ფელინგის სითხეს და ვერცხლის ნიტრატთან იძლევა ვერცხლის ქლორიდის ნალექს. $M(C_{12}H_{17}O_8Cl) = 324,5$. ნაპოვნია %: C 45,1; Cl 9,84. გამოთვლილია %: C 44,37; H 5,23; Cl 10,9. Rf 0,61 (ქლოროფორმი:მეთანოლი 19:1).

1,3,4,6-ტეტრა-0-აცეტილ-α-D-მანოპირანოზა (3). 3,8 გ ნივთიერებას (2) ხსნიან 90-100 მლ აბსოლუტურ ეთერში, უმატებენ 3გ მშრალ ვერცხლის აცეტატს და ნარევს ანჯღრევენ 2 საათის განმავლობაში სიცივეში (ხსნარში ჰალოგენის უარყოფით სინჯამდე). გაფილტვრის შემდეგ ეთერს აცილებენ ვაკუუმში. წარმოიქმნება თეთრი კრისტალები. ნივთიერებას აკრისტალებენ ეთილის სპირტიდან. გამოსავლიანობა 3 გ (73,61%). T_{ლ.} 131°C. $[\alpha]_D^{20} + 80,2^\circ$ (ქლოროფორმი). ნივთიერება კარგად იხსნება ქლოროფორმში, მეთილის და ეთილის სპირტში, პირიდინში, ცუდად წყალში, ბენზოლში. $M(C_{14}H_{20}O_{10}) = 348$. ნაპოვნია %: C 48,01; H 5,89. გამოთვლილია %: C 48,27; H 5,74. Rf 0,39 (ქლოროფორმი:მეთანოლი 19:5).

2,3,4,6-ტეტრა-0-აცეტილ-β-D-გლუკოპირანოზილ-(1,2)-1,3,4,6-ტეტრა-0-აცეტილ-α-D-მანოპირანოზა(4). 2გ 2,3,4,6-ტეტრა-0-აცეტილგლუკოპირანოზას და 2გ 1,3,4,6-ტეტრა-0-აცეტილ-მანოპირანოზას (3) ხსნიან 80 მლ მშრალ ქლოროფორმში, უმატებენ 3გ გამლღვალ თუთიის ქლორიდს და 0,8 გ კალას ქლორიდს, ანჯღრევენ 5 საათის განმავლობაში. შემდეგ ხსნარს თუთიის ქლორიდს აცილებენ გაფილტვრით, უმატებენ 3გ ფოსფორის პენტაოქსიდს და კვლავ ანჯღრევენ 10 საათის განმავლობაში. ხსნარს ფილტრავენ და ქლოროფორმს აცილებენ ვაკუუმში გადადენით. ოქტააქეტატის კრისტალების გამოყოფა ხდება მშრალი ეთერიდან აორთქლებით. მიღებული პროდუქტის გადაკრისტალებით ეთანოლიდან მიიღება 3,5გ (89,9%) სუფთა კრისტალები. T_{ლ.} 144°C. $[\alpha]_D^{20} + 34,3^\circ$ (ეთილის სპირტი). $M(C_{28}H_{38}O_{19}) = 678$. ნაპოვნია %: C 49,41; H 5,74. გამოთვლილია %: C 49,55; H 5,60. Rf 0,55 (ქლოროფორმი:მეთანოლი 19:5).

2-β-D-გლუკოპირანოზილ-α-D-მანოპირანოზა (5). 2,5გ დისაქარიდის ოქტააქეტატს ხსნიან 70მლ მშრალ ქლოროფორმში და -10°C T-ზე გაცივებისას უმატებენ 1გ ნატრიუმს 50 მლ უწყლო მეთანოლში. ნარევს ანჯღრევენ ცივ პირობებში 50 წუთი. თანდათანობით გამოიყოფა სიროფისებური მასა. შემდეგ სარეაქციო მასას უმატებენ 60 მლ ცივ წყალს და ძლიერად ანჯღრევენ. ხსნარს ფრთხილად ანეიტრალეზებენ განზ. ძმარმჟავათი. სპირტ-წყალხსნარის ფენას გამოყოფენ ქლოროფორმისაგან და აორთქლებენ ვაკუუმში მშრალი მასის მიღებამდე, რომელსაც ხსნიან 20 მლ წყალში. ხსნარს ფილტრავენ, უმატებენ 2 მლ ყინულოვან ძმარმჟავას და 3 დღე აჩერებენ სიცივეში, რის შემდეგ დისაქარიდი თანდათან გამოკრისტალდება. დისაქარიდს აკრისტალებენ ეთანოლიდან, მიიღება 1,125გ (89,2%) ნივთიერება.

სინთეზირებული დისაქარიდის აგებულება დადგენილ იქნა კვლევის ფიზიკურ-ქიმიური მეთოდებით: ელემენტური ანალიზით, ხვედრითი ბრუნვით, ინფრაწითელი სპექტრით. T_{ლ.} 149-152°C. $[\alpha]_D^{20} + 32,6^\circ$ (წყალი). $M(C_{12}H_{22}O_{11}) = 342$. მოლეკულური მასა განისაზღვრება წყალში: 0,5გ ნივთიერება 5მლ წყალში, $\Delta t = 0,53^\circ$; 0,5გ ნივთიერება 5მლ წყალში, $\Delta t = 0,52^\circ$. ნაპოვნია %: M 350,355; გამოთვლილია %: M

342. ნაპოვნია %: C 42,11; H 6,34; N 6,43. გამოთვლილია %: C 4,21; H 6,43. Rf 0,62 (ქლოროფორმი:მეთანოლი 19:1). ნივთიერების იწ სპექტრში შეიმჩნევა შთანთქმის სპექტრები 3416 სმ⁻¹ უბანში, რომელიც დამახასიათებელია ჰიდროქსილის ჯგუფებისთვის; C-O-C ჯგუფისთვის დამახასიათებელი 1052-1287 სმ⁻¹ უბანი; 1414,32-1572,20 სმ⁻¹ უბანი - CH₂ ჯგუფისთვის.

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. J. Stanek D.Sc., M. Cerny D.Sc., J. Pacak D.c. The Oligosacharides. Czechoslovak Akademy of sciences – Prague. 84-90, (1965).
2. Северов В.В., Пазынина Г.В., Овчинникова Т.В., Бовин Н.В. Синтез Олигосахаридов, содержащих внутренний и терминальный фрагмент. Институт биорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, научная статья, Москва 2015, Т. 41, №2, с.170
3. Hunt k., Jones Can J.K.N., Chem. 40, 1266 (1962)
4. Гахокидзе А.М. ЖОХ. 11, 117, (1941)
5. Гахокидзе А.М. ЖОХ. 16, 1923 (1946)
6. Гахокидзе А.М., Кутидзе Н.Д. ЖОХ. 22, 139, (1952)
7. Гахокидзе А.М., Кутидзе Н.Д. ЖОХ. 22, 247, (1952).

SYNTHESIS OF 2-β-D-GLUCOPYRANOSYL-α-D-MANNOPYRANOSE

Natia Shengelia, Lali Tabatadze, Zurab Phachulia, Ramaz Gakhokidze*
Sokhumi State University

*Ivane Javachishvili Tbilisi state University

SUMMARY

In a similar way, by the condensation reaction of 2,3,4,6-tetra-O-acetyl-glucopyranose with 1,3,4,6-tetra-O-acetyl-α-D-mannopyranose in the presence of the zinc and tean chlorides and phosphorus pentoxyde in dry chloroform and by further hydrolysis o the acetoxo groups the synthesis 2-β-D-glucopyranosyl of α-D-mannopyranose is described.

СИНТЕЗ 2-β-D-ГЛЮКОПИРАНОЗИЛ-α-D-МАННОПИРАНОЗЫ

Н.Г.Шенгелия, Л.В.Табатадзе, З.В.Пачулия, Р.А.Гахокидзе*

Сухумский Государственный Университет

*Тбилисский Государственный Университет им. Иване Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

В настоящей работе описан синтез 2-β-D-глюкопиранозил-α-D-маннопиранозы реакцией конденсации 2,3,4,6-тетра-О-ацетил-глюкопиранозил с 1,3,4,6-тетра-О-ацетил-D-маннопиранозой в присутствии хлоридов цинка и олова и оксида фосфора (V) в сухом хлороформе и последующим гидролизом ацетокси – групп.

ქიმიური ელემენტის ქრომის (Cr) წყალმცენარესთან *Spirulina platensis* ურთიერთქმედების შესახებ

ნანა კუჭავა

ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
ელეფთერ ანდრონიკაშვილის ფიზიკის ინსტიტუტი

სამუშაოში შესწავლილ იქნა ციანობაქტერია *Spirulina platensis* (*S. platensis*) უჯრედული ზრდის დინამიკაში მკვებავ *Zarrouk* გარემოში Cr(III) და Cr(VI) ქვევის თავისებურებანი, როცა აღნიშნულ გარემოში ჩატვირთულია მათი განსაზღვრული რაოდენობა. გამოყენებულ იყო ატომურ-აბსორბციული სპექტრომეტრიის (აას) მეთოდი.

ქიმიური ელემენტის ქრომის (Cr) ცოცხალ ორგანიზმებთან ურთიერთქმედების საკითხის გარკვევისადმი მიძღვნილია ბევრი სამეცნიერო შრომა. დადგენილია, რომ ის წარმოადგენს სიცოცხლისათვის აუცილებელ ქიმიურ ელემენტს. მას გააჩნია ერთერთი მთავარი როლი ადამიანის სისხლში შაქრის დონის რეგულირებაში, აგრეთვე, კანცეროგენული და ტოქსიკური ზემოქმედების უნარი. ცნობილია, რომ ქრომის მაღალი კონცენტრაცია იწვევს ცოცხალი ორგანიზმის კანცეროგენულ მდგომარეობას. ქრომის ნაერთები მონაწილეობას იღებს უჯრედებში ჟანგვა-აღდგენით რეაქციებში. ის არის ზოგიერთი ფერმენტის აქტივატორი, აგრეთვე მონაწილეობს ქოლესტერინის რეგულირებაში. ქრომი ხელს უწყობს ინსულინის მონაწილეობას ნახშირწყალბადების, ლიპიდების, ცილების და ნუკლეინის მჟავების მეტაბოლიზმში. უნდა აღინიშნოს, რომ Cr აქვს სხვადასხვა ვალენტობა: +2, +3, +4, +5, +6 და ქმნის მრავალ ნაერთს, რომელთაგან ყველაზე მდგრადია Cr(III) და Cr(VI). უფრო გავრცელებულია Cr(III), ხოლო Cr(VI) წარმოადგენს ქრომის ტოქსიკურ ფორმას, რომელიც Cr(III) - თან შედარებით უფრო ადვილად აღწევს ცოცხალ უჯრედში და იწვევს კანცეროგენულ დარღვევებს. როგორც [1] შრომაშია აღნიშნული, Cr უკმარისობა ადამიანის ორგანიზმში იწვევს საჭირო ცხიმებისა და ცილების რაოდენობათა დარღვევას, სიმაღლისა და წონის შემცირებას, მოძრაობის კოორდინაციის დარღვევას, აგრეთვე, სიცოცხლის ხანგრძლივობის შემცირებას.

ჩვენს ექსპერიმენტებში ცოცხალ ორგანიზმად განვიხილეთ ციანობაქტერია *Spirulina platensis* (*S. platensis*), რომელიც წარმოადგენს ბიოტექნოლოგიის ერთერთ მნიშვნელოვან ობიექტს. მას მსოფლიოში დიდი ყურადღება ექცევა როგორც საკვების, სამკურნალო საშუალებების და დიეტური პროდუქტების დანამატს, რომლის ათვისება ადვილად ხდება ადამიანისა და ცხოველთა ორგანიზმის მიერ, ამიტომ მან განსაკუთრებული გამოყენება მოიპოვა მედიცინასა, ფარმაცოლოგიასა და სოფლის მეურნეობაში. *S. platensis* აკმაყოფილებს ცოცხალი ორგანიზმების მოთხოვნილებას A, B, C, D, E ვიტამინებზე. ამავე დროს ის დიდად უწყობს ხელს ცოცხალ ორგანიზმებში ნივთიერებათა ცვლის მოწესრიგებას, რაც განაპირობებს მის ფართოდ გამოყენებას როგორც ზრდასრული ადამიანებისათვის, ასევე მოზარდებისათვისაც.

შრომაში [1], სხვა საკითხებთან ერთად, განხილულია ქრომის სხვადასხვა ფორმის: Cr(III) და Cr(VI) ურთიერთქმედება *S. platensis* უჯრედებთან. გამოყენებულ იქნა ნეიტრონული აქტივაციური ანალიზის მეთოდი. ჩვენს მიზანს არ წარმოადგენს დაწვრილებით იქნეს აღწერილი ცოცხალ ორგანიზმებში მიმდინარე პროცესებში Cr(III) და Cr(VI) როლის აღწერა, რაც საკმაოდ კარგადაა ჩამოყალიბებული [2] შრომაში. [3] სამუშაოში შესწავლილია *S. platensis*, როგორც ინდუსტრიული ჩამდინარე წყლებიდან ქრომისა და ნიკელის ბიოსორბენტის გამოყენების საკითხი, აგრეთვე, ქრომისა და ნიკელის შემცველობა აღნიშნული წყალმცენარის ბიომასაში და ჩამდინარე წყლებში, როგორც დროის ფუნქცია, კერძოდ, ხანმოკლე პერიოდში: 5, 15, 30 და 60 წთ-ს განმავლობაში. გაკეთებულია შესაბამისი დასკვნები.

P. Jonson, A. Shubert, [4] შრომის ავტორები, თვლიან, რომ *S. platensis* შეიძლება გამოყენებულ იქნეს ტოქსიკური ელემენტებით: კადმიუმით, ტყვიით და ვერცხლისწყლით დაჭუჭყიანებული ჩამდინარე წყლების გასუფთავებისათვის. ვარაუდობენ, რომ *S. platensis* ადამიანის ორგანიზმიდან გამოდევნის თავისუფალ რადიკალებს, რადიონუკლიდებს [5]. ბოლო წლებში მკვლევართა ყურადღებას იმსახურებს

S. platensis მიერ ოქროს, ვერცხლის და სხვა ქიმიური ელემენტის ნაწილაკების წარმოქმნის უნარი [6-7].

ე. ლ. ანდრონიკაშვილის სახელობის ფიზიკის ინსტიტუტში გამოკვლევები ჩატარებულ იქნა IPPAS B - 256 ტიპის ლურჯ - მწვანე წყალმცენარის *S. platensis* ბიომასის საშუალებით, რომელიც მიღებულ იქნა რუსეთის მეცნიერებათა აკადემიის კ. ა. ტიმირიაზევის სახელობის მეცნიერებათა ფიზიოლოგიის ინსტიტუტიდან. ექსპერიმენტების ჩატარების დროს დაცული იყო შემდეგი პირობები: $\text{pH} > 8$, მუდმივად იყო შენარჩუნებული 3500 ლუქსი განათება, 30 - 34°C ტემპერატურა, უწყვეტი ბარბატირება, ხორციელდებოდა მიკროსკოპული და pH მუდმივი კონტროლი, სწარმოებდა *S. platensis* ბიომასის დაბალტემპერატურული გამოშრობა. ყველა შემთხვევაში აღნიშნული წყალმცენარის სუსპენზიის ნიმუშების ყოველდღიურმა მიკროსკოპიულმა კონტროლმა დაამტკიცა, რომ *S. platensis* უჯრედები ციტოლოგიურად არ განსხვავდება კონტროლისაგან.

[8] სამუშაოში შესწავლილია *S. platensis* უჯრედული ზრდის პერიოდში მკვებავი Zarrouk გარემოდან წყალმცენარის ბიომასის მიერ ბიოგენური ქიმიური ელემენტების; Co, Cu, Zn, Ni, Mn, Fe და ტოქსიკური ელემენტების: Ag, Cd, Cr, Pb აკუმულაციის საკითხი, როცა წინასწარ იყო შერჩეული მათი რაოდენობა. აღნიშნული ელემენტების კონცენტრაცია მკვებავ გარემოში მათ ჩატვირთვამდე და ჩატვირთვის შემდეგ შესწავლილ იქნა ატომურ - აბსორბციული სპექტრომეტრიის (ას) საშუალებით.

წინამდებარე სამუშაოში შესწავლილ იქნა ციანობაქტერია *S. platensis* უჯრედული ზრდის დინამიკაში Zarrouk მკვებავ გარემოში Cr(111) და Cr(VI) ქცევის თავისებურებები აღნიშნულ გარემოში მათი გარკვეული რაოდენობით ჩატვირთვისას ას მეთოდის გამოყენებით. ჩატარებულ იქნა როგორც ხანგრძლივი (8 დღე), ასევე ხანმოკლე ექსპერიმენტები (10, 30, 60, 90, 120, 1440 წთ). ხანგრძლივი დროის განმავლობაში მიმდინარე ექსპერიმენტი ჩატარდა ორ სერიად. განვიხილოთ ჩატარებული ცალკეული ექსპერიმენტის შედეგი.

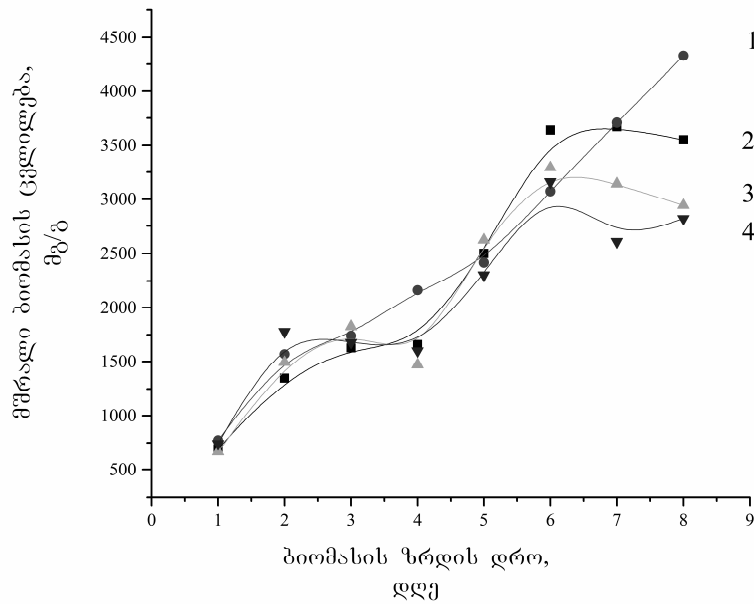
პირველ სერიაში შესწავლილ იქნა Cr(111) შემცველობა *S. platensis* ბიომასაში მკვებავ გარემოში ქრომის სხვადასხვა რაოდენობის (0.5, 2.5, 10 მგ/ლ) კონტროლთან ერთად ჩატვირთვისას. მკვებავ Zarrouk გარემოში სხვადასხვა კონცენტრაციით ჩატვირთულ იქნა ძმარმჟა ქრომის $\text{Cr}(\text{CH}_3\text{COOH})_3$ 0.1 M ხსნარი. *S. platensis* კულტივაცია მოხდა 8 დღეამის განმავლობაში ტუტე გარემოში 34°C ტემპერატურის დროს, როცა pH იცვლებოდა 9.5 დან 10 - მდე. მიღებული შედეგები წარმოდგენილია 1 ნახაზზე.

როგორც 1 ნახაზიდან ჩანს ექსპერიმენტის საწყისი დღეების განმავლობაში მკვებავ Zarrouk გარემოში Cr(111)ზემოთჩამოთვლილ რაოდენობათა ჩატვირთვით *S. platensis* ბიომასა დიდად არ იცვლება კონტროლთან შედარებით. როგორც დავინახეთ პირველ, მესამე და მეხუთე დღეს წყალმცენარის ბიომასათა მნიშვნელობები ახლოსაა ერთმანეთთან, ხოლო მათ შორის შედარებით დიდი განსხვავებაა წყალმცენარის ზრდის მერვე დღეს. რაც შეეხება კონტროლს, მისი მაქსიმალური ზრდა შესამჩნევია ზრდის დინამიკის 6 დღეს, როგორც ეს ნაჩვენებია [1] შრომაში.

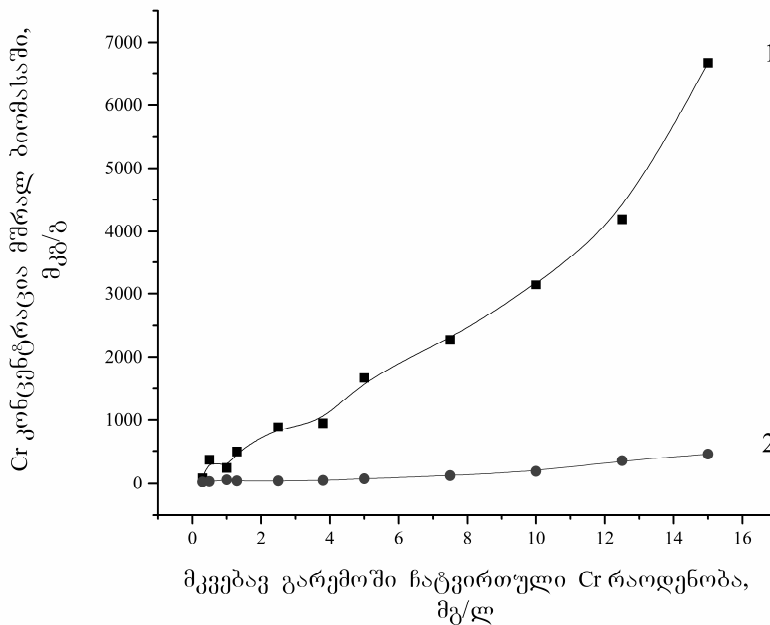
ექსპერიმენტის მეორე სერია ჩატარდა პირველი სერიის შესაბამისად. მკვებავ გარემოში, Cr(111) მსგავსად, ჩატვირთულ იქნა Cr(VI) შენაერთის კალიუმის ბიქრომატის $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ 0.1 M ხსნარი, იგივე კონცენტრაციით, როგორც Cr(111) პირობებში. ორივე სერიაში მოხდა სუსპენზიის ცენტრიფუგირება 20 წთ განმავლობაში 12000 ბრ/წთ-ს დროს და ნალექის გარეცხვა დისტილატით. პროცესი დამთავრდა იგივე პირობებში ცენტრიფუგირებით 4°C ტემპერატურისას. მიღებული ყველა ნალექი გამომშრალ იქნა 0°C-ზე დაბალ ტემპერატურაზე სპეციალური ლიოფილიზატორის საშუალებით. გამომშრალი ბიომასებისაგან დამზადებულ იქნა ნიმუშები ას მეთოდით ანალიზისათვის. მიღებული შედეგები წარმოდგენილია 2 ნახაზზე.

როგორც 2 ნახაზიდან ჩანს, წყალმცენარე *S. platensis* გარემოდან უფრო მეტად ითვისებს ძმარმჟავა ქრომის სახით ჩატვირთულ Cr(111).

ამრიგად, ჩვენს მიერ დასახული ამოცანა შესრულებულ იქნა ხანგრძლივ დროში მიმდინარე ექსპერიმენტების საშუალებით. რაც შეეხება ხანმოკლე დროში მიმდინარე ექსპერიმენტების შედეგებს, მათ განვიხილავს აქ არ შევუდგებით.



ნახ. 1. მკვებავ გარემოში Cr(111) სხვადასხვა კონცენტრაციის ჩატვირთვით გამოწვეული *S. platensis* ბიომასის ცვლილება დროის მიხედვით. ბიომასის სხვადასხვა კონცენტრაციათა მნიშვნელობების ცვლილებას შეესაბამება მრუდების ნომერი: 1 – 0.5 მგ/ლ, 2 - კონტროლი, 3 – 2.5 მგ/ლ, 4 - 10 მგ/ლ.



ნახ. 2. *S. platensis* მშრალ ბიომასაში Cr(111) და Cr(VI) კონცენტრაციის (შესაბამისად 1 და 2 მრუდები) დამოკიდებულება მკვებავ გარემოში ჩატვირთულ მათ ერთნაირ (0.3 მგ/ლ - დან 15 მგ/ლ) რაოდენობაზე.

სასიამოვნო მოვალეობად ვთვლი მადლობა გადავუხადო ჯგუფის ხელმძღვანელს ა. ბელოკობილსკის, აგრეთვე, ჯგუფის წევრებს: ე. გინტურს და ა. ხიზანიშვილს, რომლებთანაც ერთად ვმონაწილეობდი ზემოთაღნიშნული ექსპერიმენტების ჩატარებაში, ხოლო ა. რჩეულიშვილს - ასს მეთოდით მიღებული შედეგების წარმოდგენისათვის.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Л. М. Мосулишвили и др. Объединенный Институт Ядерных Исследований. Препринт. Дубна. P18-2008-8. 11 стр. 2008.
2. M. F. Frontasyeva et. all. Journal of Analytical Chemistry 64, 7, 746-749, 2009.
3. I. Zinicovskaia et. all. Desalination and Water Treatment 1-8, 2015.
4. P. Jonson, A. Shubert. Nutr. Rep. Int. 34, 6, 1053-1071, 1986.
5. L. Loseva, Y. Dardinskaya. Res.inst. Rad. Med., 6 Intl. Congress Apl. Alcology. Czeth. Republic, 1993, Sept.
6. ნ. წიბახაშვილი და სხვები. პირველი საერთაშორისო კონფერენციის თეზისების კრებული: ნანოქიმია-ნანოტექნოლოგიები. თბილისი. 37-38, 2010.
7. T. Kalabegishvili et.all. J. Nano Studies, 5, 127-136, 2012.
8. ნ. კუჭავა. J. Nano Studies, 7, 185- 192, 2013.

ON INTERACTION OF CHEMICAL ELEMENT (Cr) WITH ALGAE *Spirulina platensis*

Nana Kuchava

*I. Javakhishvili Tbilisi State University,
E. Andronikashvili Institute of Physics*

SUMMARY

The peculiarities of the behaviour Cr(III) and Cr(VI) in the dynamics of cell growth of cyanobacteria *Spirulina platensis* (*S. platensis*) in Zarroyk nutrient medium when its certain quantity is introduced into the mentioned medium has been studied in the work. The Method of Atom – absorption spectrometry (AAS) was used.

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ХИМИЧЕСКОГО ЭЛЕМЕНТА ХРОМА (Cr) С ВОДОРОСЛЬЮ *Spirulina platensis*

Нана Кучава

*Тбилисский государственный университет им. Ивана Джавахишвили,
Институт физики им. Элефтера Андроникашвили*

РЕЗЮМЕ

В работе были изучены свойства Cr(III) и Cr(VI) в динамике клеточного роста цианобактерии *Spirulina platensis* (*S. platensis*), когда в питательной среде Zarroyk загружены их известные количества. Был использован метод атомно – абсорбционной спектрометрии (ААС).

ნიადაგიდან Cu, Mn, Cd, Zn-ის შეთვისებისა და განაწილების შესწავლა ხორბალსა და ქერში

ოლია რჩელიშვილი, ლელა ტულუმი, ეთერ გინტური, ელენე კირკესალი,
ალექსანდრე რჩელიშვილი

*ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
ელეფთერ ანდრონიკაშვილის ფიზიკის ინსტიტუტი*

შესწავლილია ლაბორატორიულ პირობებში საქართველოს ენდემური ჯიშის მარცვლეულებში - ხორბალში [დოლი (*Triticum georgicum*)] და ქერში [*Hordeum sativum* Lessen (*Hordeum L.*)] Cu, Mn, Cd, Zn-ის ნიადაგიდან შეთვისების უნარი. მცენარეთა ზრდა-განვითარების სხვადასხვა პერიოდში ელემენტების შემცველობის შესწავლა ხდებოდა მცენარეების ცალკეულ ორგანოებში - ფესვებში, ღეროებში და ფოთლებში. ელემენტთა კონცენტრაციები განისაზღვრა ატომურ აბსორბციული სპექტრომეტრის საშუალებით. ხორბალში და ქერში ყველა ელემენტის დაგროვება საგრძნობლად მეტია ფესვებში, ვიდრე ღეროსა და ფოთლებში. ღეროებში კი უმეტეს შემთხვევებში დაგროვება უფრო მეტია, ვიდრე ფოთლებში. ელემენტების კონცენტრაციების შედარებითი ანალიზი აჩვენებს, რომ შესწავლილ კულტურებში მათი ათვისების უნარი შეიძლება წარმოვადგინოთ შემდეგი თანმიმდევრობით $Cd > Zn > Mn > Cu$.

აღნიშნული ელემენტები მიეკუთვნებიან აქტიურ ნივთიერებათა ჯგუფს, რომლებიც ჭარბი კონცენტრაციების დროს ტოქსიკურია ცოცხალი ორგანიზმებისთვის. გარემოში ისინი ძირითადად ვრცელდებიან ადამიანების სხვადასხვა საქმიანობის შედეგად. ჰაერში და ნიადაგებში ელემენტების გავრცელების წყაროებს წარმოადგენენ მრეწველობის სხვადასხვა ობიექტები, თბოელექტროსადგურები, მანქანების გადამამუშავებელი საწარმოები, სამთო მომპოვებელი მრეწველობის ობიექტები და მათი ნარჩენები, ტრანსპორტი და ბევრი სხვ. [1-3]. აღნიშნულ პროცესში თავისი წვლილი შეაქვს აგრეთვე ბუნებრივ გეოქიმიურ პროცესებს - მაგმატურსა და ეროზიულს [4]. ატმოსფერული ნალექები ასევე შეიცავენ მძიმე ლითონების გარკვეულ რაოდენობას და მოქმედებენ აგრო სავარგულებზე [5]. უფრო მეტიც - აგრარულ პრაქტიკაში ხშირად იყენებენ ფოსფატ სასუქებს, სამრეწველო წარმომავლობის ჩამდინარე წყლებს, საცხოვრებელ ნარჩენებს, რომლებიც ხელს უწყობენ მძიმე ლითონების კონცენტრაციების ზრდას გარემოში და ნიადაგებში [5, 6].

ლითონებით დაბინძურების პრობლემა საქართველოში დაკავშირებულია როგორც ამჟამად არსებულ მრეწველობის მდგომარეობასთან, ასევე საბჭოეთის დროიდან დარჩენილ მიტოვებულ საწარმოებთან [7, 8].

მეტად აქტუალურია მძიმე ლითონების შეთვისების უნარის შესწავლა საკვები მცენარეების მიერ, მათ შორის მარცვლეული კულტურების, როგორც ადამიანის ძირითადი საკვები პროდუქტისა [9]. მცენარის იმ ნაწილის საშუალებით, რომელიც მოიხმარება საკვებად, ზოგიერთი მძიმე ლითონი კვების არხების გავლისას ხვდება ადამიანის ორგანიზმში და აკუმულირებას განიცდის [10].

მძიმე ლითონების მარცვლეულ კულტურებთან ურთიერთქმედების შესასწავლად ეფექტურია მიზნობრივი ექსპერიმენტების ჩატარება მცენარეების ზრდის პროცესში. ანალოგიური ტიპის ექსპერიმენტები აღწერილია ჩვენს ადრინდელ ნაშრომებში [11, 12]. მოცემული სამუშაოს მიზანს წარმოადგენს ხორბლისა და ქერის კულტივაციის დროს მცენარის სხვადასხვა ორგანოში Cu, Mn, Cd და Zn შეთვისების პროცესის შესწავლა.

ექსპერიმენტები ტარდებოდა ლაბორატორიულ პირობებში. მარცვლეულის კულტივაცია მიმდინარეობდა სპეციალურ კონტეინერებში ზომებით 75x20x19 სმ³. კონტეინერები მოთავსდა 100x60x100 სმ³ მოცულობის შუშისა და ორგანოპლასტიკატის სათბურთან, რომლის განათება ხორციელდებოდა დღის სინათლის 14 ვატიანი სიმძლავრის 12 ნათურის საშუალებით. მცენარეების კულტივაცია ხდებოდა მუდმივ ტემპერატურაზე, რომლის კონტროლი იყო უზრუნველყოფილი. სპეციალურად შერჩეულ მიწის ნაკვეთზე აღებული ნიადაგი წინასწარ ტესტირებული იქნა მექანიკურ შემადგენილობაზე, ნემომპალას ხარისხზე, მჟავიანობაზე (pH). შესწავლილი იქნა აგრეთვე სრული აზოტისა და აზოტის ჰიდროლიზატის, ფოსფორის, მოძრავი კალიუმის, კარბონატების, სრული

მარილების და მიკროელემენტების (Cd, Cu, Zn და Mn) მოძრავი ფორმების რაოდენობა. შერჩეული ნაკვეთის ნიადაგში წინასწარ განსაზღვრული მიკროელემენტების კონცენტრაციები შეადგენდა: Cd – 0,15 მგ/კგ, Cu – 1,41მგ/კგ, Zn – 28,8მგ/კგ, Mn – 33,1მგ/კგ.

ექსპერიმენტისთვის საჭირო ნიადაგი წინასწარ იყო გაწმენდილი ქვებისგან, უცხო მინარევებისაგან და შემდეგ გაცრილი.

კვლევის ობიექტებად არჩეული იქნა ხორბლისა და ქერის თითო ენდემური ჯიში, რომლებიც მეტწილად გამოიყენება საქართველოში: ხორბლის ჯიში - დოლი (*Triticum georgicum*) და ქერის ჯიში *Hordeum sativum Lessen (Hordeum L.)*

ექსპერიმენტისთვის შერჩეული ელემენტები (Cd, Zn, Mn, Cu) ნიადაგში შეტანილი იქნა ამ ლითონების შემცველი ხსნადი მარილების სახით: $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, CdSO_4 , ZnSO_4 , $\text{MnSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. ამისთვის მომზადებული ხსნარების კონცენტრაციები შეადგენდა: Cu – 5,1გ/ლ, Cd – 5,3გ/ლ, Zn – 5,2 გ/ლ, Mn – 5 გ/ლ. მიღებული ხსნარები შეტანილი იქნა ისეთი რაოდენობით, რომ მისი ჰომოგენიზაციის შემდეგ, ლითონის კონცენტრაცია ნიადაგში, თითოეულ კონტეინერში ხდებოდა 40მგ/ლ. ამგვარად მომზადებულ კონტეინერებში დაითესა შერჩეული ჯიშის ხორბალი და ქერი. ამის გარდა, შედარებისათვის სუფთა ნიადაგში დაითესა იგივე მცენარეები, რომლებშიც შემდგომ ხდებოდა დაკვირვება შესასწავლი ელემენტების კონცენტრაციებზე. მცენარეები იწყებოდა ყოველდღიურად საჭირო ტენიანობის შესანარჩუნებლად (3%). ასევე სისტემატურად კონტროლდებოდა ნიადაგის მჟავიანობა (pH – 7,5).

კონტეინერებიდან მცენარეების ნიმუშების აღება ხდებოდა დათესვიდან დაახლოებით 28 - 30 დღის ინტერვალით. აღებული მცენარეები ირეცხებოდა დისტილირებული წყლით და ვანაწევრებით ცალკეულ ორგანოებად - ფესვები, ღეროები, ფოთლები. ნიმუშები შრებოდა საშრობ კარადაში (80 °C) მუდმივ წონამდე, რის შემდეგ ვაქუცმაცებდით მექანიკური საფქვავის საშუალებით.

ატომურ აბსორბციული სპექტრომეტრიისთვის (აას) ნიმუშებს, დაახლოებით 30 მგ რაოდენობით, ვათავსებდით შესაბამისად მარკირებულ სინჯარებში, ვუმატებდით კონცენტრირებულ აზოტმჟავას და ვაცხელებდით ჰომოგენური ხსნარის მიღებამდე. შემდეგ ვაზავებდით ბიდისტილატით საჭირო მოცულობამდე. ლითონების კონცენტრაციების განსაზღვრა ტარდებოდა ატომურ აბსორბციული სპექტრომეტრიის მეთოდით. მეთოდის საფუძველს წარმოადგენს ელემენტების რაოდენობრივი განსაზღვრა სინათლის ატომური შთანთქმის (აბსორბციის) საშუალებით მოცემული ელემენტის ატომებიდან.

ატომურ აბსორბციული სპექტრომეტრიის ლაბორატორია ე-ანდრონიკაშვილის სახ. ფიზიკის ინსტიტუტში აღჭურვილია სპექტრომეტრებით: „Analyst 800“, „Beckman-495“ და C-115. სპექტრომეტრი „Analyst 800“ წარმოადგენს თანამედროვე ატომურ აბსორბციულ ხელსაწყოს, რომლის საშუალებით ელემენტების კონცენტრაციის განსაზღვრა შესაძლებელია როგორც აბსორბციულ, ასევე ემისიურ რეჟიმში - სპექტრალურ დიაპაზონში 190-900 ნმ.

ანალიზის დროს წინასწარ გამზადებული ნიმუშის ხსნარი აეროზოლის სახით შეაქვთ აცეტილენ-ჰაერის ალში. თითოეული მოცემული ელემენტის გაზომვის დროს სპექტრომეტრი ავტომატურად ირჩევს ოპტიმალურ რეჟიმს: ელემენტისთვის დამახასიათებელ სინათლის რეზონანსულ ტალღის სიგრძეს, ჰაერისა და აცეტილენის ხარჯს (ლ/წთ), მანძილს ატომიზატორის ღრეჩოდან ატომური შთანთქმის ზონამდე h (სინათლის სხივის მიერ ალის განჭოლების ზონას), მონოქრომატული ღრეჩოს სიგანეს, სპექტრალური ნათურის კვების დენს.

ეტალონურ ხსნარებად გამოყენებული იყო „Perkin Elmer“-ის ფირმის 1მგ/მლ კონცენტრაციის სტანდარტული ხსნარები (საწყისი ხსნარი), საიდანაც განზავებით მზადდებოდა მუშა ხსნარები. ანალიზური მეთოდის ფარდობითი ცდომილება ტოლი იყო 5 – 10 %.

მარცვლეულის კულტივირების დროს, ვიზუალურად სხვასთან შედარებით უკეთესად გამოიყურებოდა მცენარეები სპილენძიან კონტეინერებში (ჯეჯილი იყო ხასხასა-მწვანე ფერის - მსხვილი ღეროებით), ყველაზე ცუდად კი - კადმიუმის და თუთიის შემცველ კონტეინერებში (ჯეჯილი იყო სუსტი, ადრე დაიწყო გაყვითლება. აღებული იქნა მხოლოდ 4 ნიმუში). არც ერთ შემთხვევაში თავთავის წარმოქმნას ადგილი არ ჰქონია.

მცენარეების მიერ აკუმულირებული ელემენტების კონცენტრაციები, განსაზღვრული ატომურ აბსორბციული სპექტრომეტრიის საშუალებით, ხორბლისა და ქერის ცალკეულ ორგანოებში ნაჩვენებია ცხრილებში 1 და 2.

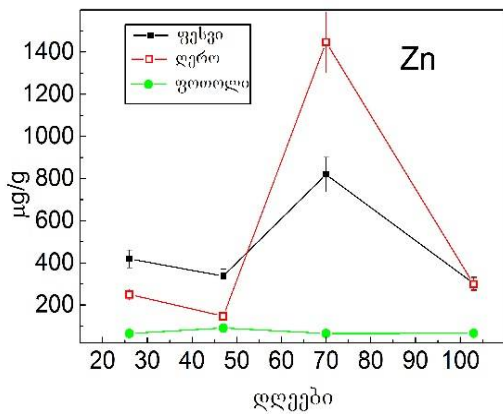
ცხრილი 1. ელემენტების კონცენტრაციები ხორბლის ნიმუშებში (მკგ/გ)

| | I ნიმუში, 26 დღე | | | II ნიმუში, 47 დღე | | | III ნიმუში, 70 დღე | | | IV ნიმუში, 103 დღე | | | V ნიმუში, 126 დღე | | |
|----|------------------|-------|--------|-------------------|-------|--------|--------------------|--------|--------|--------------------|--------|--------|-------------------|-------|--------|
| | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი |
| Cd | 536,67 | 62,07 | 18,35 | 515,12 | 48,38 | 20,87 | 230 | 41,07 | 2,67 | 534,85 | 50 | 21,03 | - | - | - |
| Zn | 418,75 | 250 | 65,04 | 336,96 | 147 | 91,27 | 819,57 | 1446,5 | 64,93 | 302,04 | 298,25 | 65,7 | - | - | - |
| Mn | 659,52 | 45,65 | 44,78 | 419,05 | 68,89 | 64,35 | 110,64 | 115,87 | 55,59 | 117,14 | 26,67 | 35,42 | 81,25 | 35,80 | 47,13 |
| Cu | 156,25 | 125 | 20,42 | 180,77 | 41,75 | 23,89 | 154,76 | 24,56 | 12,67 | 206,15 | 19,16 | 12,69 | 304,94 | 38,97 | 28,53 |

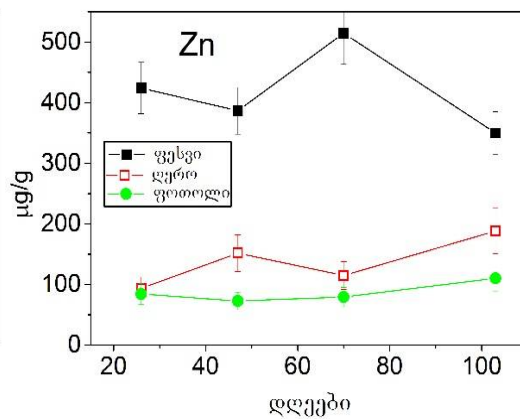
ცხრილი 2. ელემენტების კონცენტრაციები ქერის ნიმუშებში (მკგ/გ)

| | I ნიმუში, 26 დღე | | | II ნიმუში, 47 დღე | | | III ნიმუში, 70 დღე | | | IV ნიმუში, 103 დღე | | | V ნიმუში, 126 დღე | | |
|----|------------------|-------|--------|-------------------|--------|--------|--------------------|--------|--------|--------------------|--------|--------|-------------------|-------|--------|
| | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი | ფესვი | ღერო | ფოთოლი |
| Cd | 200 | 26,09 | 5,26 | 671,43 | 42,59 | 22,64 | 280,55 | 19,08 | 9,31 | 300 | 40,28 | 16,03 | - | - | - |
| Zn | 424,29 | 93,44 | 84,23 | 386,67 | 151,58 | 72,57 | 514,91 | 114,58 | 79,14 | 350 | 188,18 | 110,14 | - | - | - |
| Mn | 1035 | 74,68 | 88,11 | 744,92 | 53,85 | 82,64 | 295,45 | 61,11 | 54,29 | 229,05 | 29,06 | 59,58 | 200 | 27,67 | 61,11 |
| Cu | 228 | 19,4 | 24,74 | 398,39 | 18,67 | 21,25 | 228,70 | 17,48 | 11,49 | 564,18 | 44,59 | 29,62 | 158,33 | 20,18 | 21,18 |

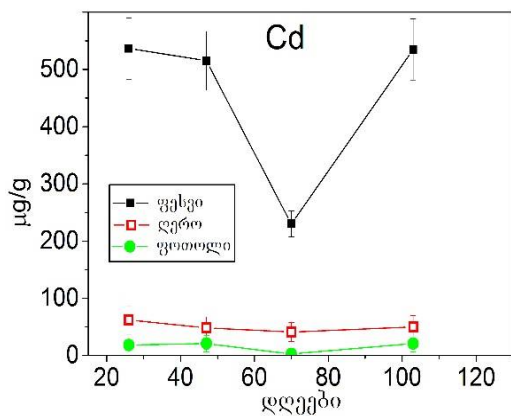
ცხრილში ნაჩვენებია შედეგები გრაფიკულად თუთიისთვის და კადმიუმისთვის მოცემულია ნახ. 1, 2, 3, 4.



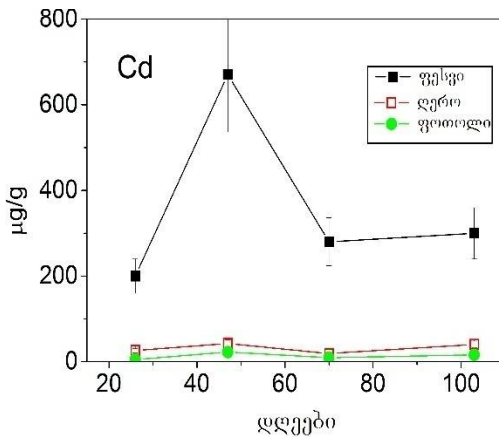
ნახ. 1. Zn-ის კონცენტრაციები ხორბალში.



ნახ. 2. Zn-ის კონცენტრაციები ქერში.



ნახ. 3. Cd-ის კონცენტრაციები ხორბალში.



ნახ. 4. Cd-ის კონცენტრაციები ქერში.

ხორბალში და ქერში ყველა ელემენტის დაგროვება საგრძნობლად მეტია ფესვებში, ვიდრე ღეროსა და ფოთლებში. ღეროში კი უმეტეს შემთხვევებში დაგროვება უფრო მეტია, ვიდრე ფოთლებში.

ელემენტების კონცენტრაციების შედარებითი ანალიზი აჩვენებს, რომ შესწავლილ კულტურებში ელემენტების ათვისების უნარი შეიძლება პირობითად წარმოვადგინოთ შემდეგი მიმდევრობით $Cd > Zn > Mn > Cu$. მანგანუმისა და სპილენძის შთანთქმის განსხვავება უმნიშვნელოა.

ელემენტების შეღწევაობა მცენარეებში არის სხვადასხვა და დამოკიდებულია ნიადაგში მათი ხსნადი ნაერთების არსებობაზე [13]. გამოსაკვლევად არჩეული ოთხი ელემენტიდან (Cu, Mn, Cd, Zn) მცენარეებში ყველაზე ადვილად შეღწევაობა ტოქსიკური Cd, რომელსაც აგრეთვე დაგროვების ტენდენცია გააჩნია. კადმიუმი არის ერთ-ერთი ყველაზე საშიფათო დამაბინძურებელი ნივთიერება აგრარული პროდუქციისთვის და განსაკუთრებულად მარცვლეული კულტურებისთვის. ადამიანის ორგანიზმში ის იწვევს თირკმელების დისფუნქციას, ფილტვების დაზიანებას, გულისა და სისხლძარღვთა დაავადებებს და ა. შ. კადმიუმის აკუმულაციის სიჩქარე არის უკუპროპორციულ დამოკიდებულებაში კალციუმის კონცენტრაციასთან [14, 15].

კადმიუმისგან განსხვავებით Cu, Mn, და Zn მცირე კონცენტრაციებში წარმოადგენენ სასიცოცხლოდ მნიშვნელოვან ელემენტებს, ხოლო დიდ კონცენტრაციებში მათი მოქმედება ასევე დამაზიანებელია. Zn და Cu შედარებით ადვილად აღწევენ მცენარეებში, ხოლო Mn - უფრო ძნელად. ჩვენს მიერ მიღებული შედეგები ძირითადად ადასტურებენ ამ მოსაზრებებს. ცნობილია, რომ შესწავლილი მძიმე ლითონების შთანთქმა მარცვლეულის მიერ დამოკიდებულია ამ ლითონების ხსნადი ნაერთების არსებობაზე ნიადაგში. ჩვენს მიერ ჩატარებულმა ცდებმა აჩვენა, რომ ყველა შემთხვევაში ლითონების დაგროვება ფესვებში მეტია, ვიდრე ღეროებში და ფოთლებში. ტოქსიკური ელემენტი - კადმიუმი აკუმულირდება ყველაზე მეტად. მათი ათვისების უნარი შეიძლება პირობითად წარმოვადგინოთ შემდეგი მიმდევრობით $Cd > Zn > Mn > Cu$.

სამუშაო სრულდებოდა Grant #STCU-SRNSF 5635 (09/14) from the Ukrainian Science and Technology Centre (STCU) „Studying the accumulation and distribution of toxic elements by some Georgian feed plants“ ფარგლებში.

ლიტერატურა – ЛІТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Bradl H. Heavy Metals in Environment: Origin, Interaction and Remediation. Academic Press. 2005.
2. Smith S. R. A Critical Review of Bioavailability and Impact of Heavy Metals in Municipal Solid Waste Composts Compared to Sewage Sludge. Environment International 35, (1), 142, 2009, www.journal.elsevier.com/environment-international.
3. Dudka, S. and Adriano, D. C. 1997. Environmental impacts of metal ore mining and processing: A review. Journal of Environmental Quality, 26, 590–602.
4. Adriano B. J. Trace Elements in Terrestrial Environment: Biogeochemistry, Bioavailability, and Risks of Metals. Springer, New York, 2001.
5. Azimi S., Rocher V., Garnaud S., Varrault G., Thevenot D. R. Decrease of Atmospheric Deposition of Heavy Metals in an Urban Area from 1994 to 2002 (Paris, France). Chemosphere 61, 645, 2005.
6. Florijin P.J., Van Beusichem M.L. 1993. Uptake and distribution of Cd in Maize inbred line. Plant Soil 150:25-193.
7. E. Safirova. The Mineral Industry of Georgia. USGS, US Geological Survey Mineral Yearbook 2011, Advance Release, June 2013.
8. P. Felix-Henningsen, T. Urushadze, D. Steffens, B. Kalandadze, E. Narimanidze. Uptake of heavy metals by food crops from highly-polluted Chernozem-like soils in an irrigation district south of Tbilisi, eastern Georgia. Agronomy Research 8 (1) 781–795, 2010.
9. Gupta, U. C. and Gupta, S. C. 1998. Trace element toxicity relationships to crop production and livestock and human health: Implications for management. Communications in Soil Science and Plant Analysis, 29, 1491–1522.

10. Asami T. 1981. In: Heavy metal pollution in soils of Japan. Japan-Scientific Societies Press, Tokyo. pp. 257-274.
11. O.A. Rcheulishvili, N.O. Metreveli, T. Kalabegishvili, A.N. Rcheulishvili, N.A. Rcheulishvili, T. Korpela, L.S. Tugushi and A.I. Abashidze. Accumulation and Distribution of Cd, Zn, Cu and Mn in Barley. Georgian Engineering News, N 3, 2014, 7 – 12.
12. ა. რჩეულიშვილი, ე. გინტური, ო. რჩეულიშვილი, ლ. ტუღუში, ნ. რჩეულიშვილი, ე. ღვალაღუტაშვილი. სპილენძისა და თუთიის აკუმულაცია ზორბლისა (*Triticum*) და ქერის (*Hordeum*) მიერ. Nano Studies, 2014, 10, 107-110.
13. I. Grabowska, Reduction of Heavy Metals Transfer into Food, Review, Polish J. of Environ. Stud. Vol. 20, No. 3 (2011), 635-642.
14. F. T. Bingham. Bioavailability of Cd to food crops in relation to heavy metal content of sludge-amended soil. Environ Health Perspective 1979 Feb. 28: 39 – 43.
15. Matt K. John. Cadmium uptake by eight food crops as influenced by various soil levels of cadmium. Environmental Pollution (1970) Volume 4, Issue 1, January 1973, Pages 7-15.

STUDYING INTAKE PROCESS OF Mn, Cd AND Zn FROM SOIL AND THEIR DISTRIBUTION IN WHEAT AND BARLEY

Olia Rcheulishvili, Lela Tughushi, Eter Ginturi, Elene Kirkesali, Alexander Rcheulishvili
Ivane Javakishvili Tbilisi State University,
Elephter Andronikashvili Institute of Physics

SUMMARY

In the given work Cu, Mn, Cd, Zn absorption ability in Georgian endemic cereals: wheat – (*Triticum georgicum*) and in barley [*Hordeum sativum Lessen (Hordeum L.)*] from the soil in laboratory conditions was studied. The elements' content was studied in different organs of plants – roots, stems and leaves during different period of plant growth and development. The concentrations of elements were studied with atomic absorption spectrometer. In wheat and barley accumulation of all the elements is quite more in roots than in stems and leaves. In the most of the cases the accumulation in stems is more than in leaves. The comparative analysis of elements' concentrations shows that in the studied cultures their ability of assimilation may be presented with the following sequence: Cd>Zn>Mn>Cu.

ИССЛЕДОВАНИЕ УСВОЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ Cu, Mn, Cd И Zn ИЗ ПОЧВЫ И ИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В ПШЕНИЦЕ И ОВСЕ

О.А.Рчеулишвили, Л.С.Тугуши, Е.Н.Гинтури, Е.И.Киркесали, А.Н.Рчеулишвили
Тбилисский государственный университет им. И.Джавахишвили,
Институт физики им. Э.Андроникашвили

РЕЗЮМЕ

В представленной работе изложены результаты исследования способности усвоения элементов Cu, Mn, Cd и Zn из почвы в лабораторных условиях эндемичными грузинскими сортами зерновых культур пшеницы [*доли (Triticum georgicum)*] и овса [*Hordeum sativum Lessen (Hordeum L.)*]. Распределение элементов изучали в отдельных органах растений – корнях, стеблях и листьях в различные периоды их развития. Концентрации элементов определяли методом атомно-адсорбционной спектрометрии. Определено, что у пшеницы и овса корни накапливают больше элементов, чем стебли и листья. В стеблях их содержание больше, чем в листьях. Согласно результатам анализа, в исследованных культурах способность усвоения изученных элементов выражается последовательностью $Cd > Zn > Mn > Cu$.

მოდულირებული ასკან-თიხის მიღება და კვლევა

ლეილა ჯაფარიძე, ციალა გაბელია, ეთერ სალუქვაძე, ნანა ოსიპოვა, თამარ კვერნაძე, ქეთევან ებრალიძე

*ივ. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის
პ. მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

სინთეზირებული Fe(II), Co(II), Zn(II), Cu(II), Mn(II)-ფრუქტოზის კომპლექსებით და სელენმეთიონინით მოდიფიცირების გზით მიღებულია ცხოველთა სამკურნალო/პროფილაქტიკური დანიშნულების, პერორალურად მისაღები ასკან-თიხის მყარი ფორმა. შესწავლილია მოდიფიკაციის ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები, სტრუქტურის წარმოქმნის უნარი და რეოლოგიური მახასიათებლები. დადგენილია, რომ აღნიშნული თვისებების მიხედვით ისინი აკმაყოფილებენ სამკურნალო საშუალებების მიმართ წაყენებულ მოთხოვნებს.

სოფლის მეურნეობის რენტაბელობის ამაღლების საჭიროებამ მეცნიერთა წინაშე დააყენა ადგილობრივი რესურსების გამოყენებით ახალი, ბიოგენური მიკროელემენტების შემცველი ლითონდეფიციტური ანემიის სამკურნალო საშუალებების მიღების მიზანშეწონილობა, რომელთაც ექნებათ ცოცხალ ორგანიზმში ხანგრძლივი ქმედების უნარი, იქნებიან ეკოლოგიურად უსაფრთხო, კონკურენტუნარიანი და გაცილებით იაფი უცხოურ ანალოგებთან შედარებით. აღნიშნული მიზნიდან გამომდინარე, დღესდღეობით ფართოდ გამოიყენება ხელატური სტრუქტურის საკურნალო საშუალებები, როგორც პერორალურად მისაღები, ასევე ინექციის სახით [1-4]. კვლევის მიზანს მეცხოველეობაში, კერძოდ მელორეობაში (სადაც ახლადშობილ გოჭების დაცემის მაჩვენებელი განსაკუთრებით მაღალია) გამოსაყენებელი სამკურნალო /პროფილაქტიკური საშუალებების მიღება წარმოადგენდა. ახლადშობილი გოჭებისათვის დაგეგმილი პროფილაქტიკური ღონისძიებების სახით ეფექტურია საჭირო მიკროელემენტების-(Fe, Co, გლიცინი) შემცველი საინექციო საშუალებების, ხოლო მოზარდი პირუტყვისათვის მიკროელემენტების შედარებით ფართო სპექტრის შემცველი-(Fe, Co, Zn, Mn, Cu, Se), პერორალურად მისაღები თხევადი ან მყარი მოდიფიკაციების გამოყენება. კვლევის მიზანს შეადგენდა მეცხოველეობაში (მელორეობაში) გამოსაყენებელი პერორალურად მისაღები მყარი მოდიფიკაციების მიღება, ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების კვლევა, მათი აღნიშნული თვისებების მიხედვით სამკურნალო საშუალებების მიმართ წაყენებული მოთხოვნებისადმი შესაბამისობის დადგენა.

სინთეზირებული პერორალურად მისაღები მოდიფიკაციები წარმოადგენს სასიცოცხლოდ აუცილებელი მიკროელემენტების- რკინის, კობალტის, თუთიის, მანგანუმის, სპილენძის ხელატური სტრუქტურის კომპლექსების, ორგანული ნაერთის- სელენმეთიონის და ასკან-თიხის შემცველ, კომპოზიციურ სამკურნალო/პროფილაქტიკური საშუალებად გამიზნულ სისტემას. აღნიშნულ სამკურნალო/პროფილაქტიკურ საშუალებაში ასკანას ადგილმდებარეობის (საქართველო) ასკან-თიხის სარჩულად გამოყენების მიზანშეწონილობა განპირობებულია ბენტონიტური თიხის პროლონგირების უნარით და მაღალეფექტური სამკურნალო თვისებებით კუჭ-ნაწლავის ტრაქტის სხვადასხვა დაავადებების პირობებში. ზემოაღნიშნული კომპოზიციური პროფილაქტიკურ/სამკურნალო საშუალება კომპლექსში შემავალი მიკროელემენტების ხარჯზე ადვილათვისებადი, არატოქსიური, კოორდინაციული სახით შეავსებს მათ დეფიციტს ორგანიზმში, ხოლო ასკან-თიხა გამორიცხავს ან მინიმუმამდე დაიყვანს ანემიის მუდმივად თანმდევ გვერდით მოვლენებს.

ასკან-თიხის მოდიფიცირება ჩატარდა სხვადასხვა მჟავურობის პირობებში. დადგინდა, რომ pH=3,5-5,0 ინტერვალში თიხის ზედაპირზე კომპლექსების ადსორბცია მაქსიმალურია. წინასწარ გაჯირჯვებულ და მოზეილ ასკანთიხას (pH=9,15, სინესტე=25%), შემჟავების შემდეგ ინტენსიური მორევეთ დადგენილი დოზის მიხედვით დაემატა კომპოზიციური ხსნარი (ცხრ. 1). მიიღებოდა მუქი ყავისფერი სუსპენზია (pH=6), რომლის 60°C-ზე გაშრობით და დაფქვით მიღებული იყო ანტიანემიური დანიშნულების კომპოზიციური, მყარი მოდიფიკაცია.

საკვლევი ნიმუშების თერმოგრამების შედარების შედეგად ირკვევა, რომ მოდიფიცირება ცვლის DTA- მრუდის ხასიათს, მასზე აღინიშნება ინტენსიური ეგზოთერმული (250–580°C), რაც დაკავშირებულია თიხის ზედაპირზე ადსორბირებული მოდიფიკატორის თერმოჟანგვით დესტრუქციასთან, ამასთან მთლიანად შენარჩუნებულია მონტმორილონიტისათვის დამახასიათებელი სამივე ენდოთერმული თერმოგრამეტრული კვლევის შედეგები წარმოდგენილია ცხრილი 1-ის სახით. ამრიგად ლითონკომპლექსებით მოდიფიცირება არ ცვლის ასკან-თიხის კრისტალურ სტრუქტურას, ჩატარებული კვლევების მიხედვით, ის მთლიანად შენარჩუნებულია.

ცხრილი 2. ასკან-თიხის მოდიფიცირებული ნიმუშების თერმოგრამეტრული კვლევის შედეგები

| ნიმუში | მასის საერთო დანაკარგი, % | I ენდოთერმული, °C | II ენდოთერმული, °C | III ენდოთერმული, °C | ეგზო-თერმული, °C |
|---------------------------|---------------------------|-------------------|--------------------|---------------------|------------------|
| ასკან-თიხა | 13,56 | 40-210 | 640-720 | 820-920 | -- |
| მოდიფიცირებული ასკან-თიხა | 26,4 | 40-190 | 580-700 | 775-860 | 290-580 |

როგორც აღინიშნა, კვლევის მიზანს შეადგენდა ლითონდეფიციტის სამკურნალო/პროფილაქტიკური საშუალებების მიღება, რომლებიც სტრუქტურულ-მექანიკური თვისებების და რეოლოგიური თვისებების მიხედვით უნდა აკმაყოფილებდნენ სამკურნალო საშუალებების მიმართ წაყენებულ კრიტერიუმებს, უნდა ხასიათდებოდნენ სუსტი სტრუქტურით და ორგანიზმში დაშლის მოკლე პერიოდით. სტრუქტურის წარმოქმნის უნარი ასკან-თიხის და მოდიფიცირებული ასკან-თიხის 8% სუსპენზიებში გაიზომა ველიერ-რეზინდერის ხელსაწყო საშუალებით /6/. დადგინდა, რომ მოდიფიცირებული ნიმუშის სუსპენზია ხასიათდება სტრუქტურის განმტკიცების უნარით, ამასთან აღნიშნული თვისება საკონტროლო ასკან-თიხის სტრუქტურასთან შედარებით გაცილებით სუსტადაა გამოხატული. ასკან-თიხის სუსპენზიის სტრუქტურის განმტკიცება გრძელდება 120 საათის განმავლობაში, მოდიფიცირებული ნიმუშისა კი სრულდება 24 საათში. სტრუქტურების სიმტკიცე შესაბამისად შეადგენს 3,5 და 0,49 Pa.

საკვლევი ასკან-თიხის და მოდიფიცირებული ნიმუშების 8% წყალსუსპენზიების რეოლოგიური თვისებების კვლევა ჩატარდა როტაციულ ვისკოზიმეტრზე “Reotest-2“; $1,5-1310 \text{ sec}^{-1}$ სიჩქარისგრადიენტის დიაპაზონში, ტემპერატურა 20°C. საკვლევი ნიმუშები მომზადდა ასკან-თიხის წყლიანი პასტის (სინესტე 25%) საფუძველზე, რომელსაც შეეზილა მოდიფიკატორი- კომპოზიციური ხსნარი (ცხრ.1) კვლევის შედეგები, ჩატარებული მყარი მოდიფიკაციის მომზადების მკვლელობის (PH=3,5) და კუჭის წვენის მკვლელობასთან მიახლოებულ პირობებში (PH=1,5-2,0) წარმოდგენილია ცხრ. 3-ის სახით. როგორც ცხრილიდან ჩანს, მოდიფიცირებული ასკან-თიხის სუსპენზია საკონტროლოსთან შედარებით ხასიათდება მეფე და ერთი რიგით დაბალი სიმტკიცის სტრუქტურით, ამასთან მოდიფიცირებულ ნიმუშებში ეფექტური სიბლანტე იზრდება და სტრუქტურის რღვევის ხასიათი პლასტიურია, რაზეც მიუთითებს სტატისტიკური პლასტიურობის სიდიდე Pk_1/η_1 რომელიც ერთი რიგით მაღალია ($1,24 \cdot 10^{-2} \text{ sec}^{-1}$), ვიდრე საკონტროლო ნიმუშში ($1,95 \cdot 10^{-3} \text{ sec}^{-1}$)

ცხრილი 3. ასკან-თიხის 8% წყალსუსპენზიების რეოლოგიური დახასიათება

| კვლევის ობიექტი | pH | პლასტიური სიბლანტე | | დენადობის პირობითი ზღვარი | | სტატისტიკური პლასტიურობა $Pk_1/\eta_1 \times 10^{-2} \text{ sec}^{-1}$ |
|--------------------------|-----|---|--|---------------------------------|------------------------------|--|
| | | საწყისი $\eta, \text{ Pa} \cdot \text{sec}$ | უმცირესი $\eta, \text{ Pa} \cdot \text{sec}$ | სტატისტიკური $Pk_1, \text{ Pa}$ | დინამიური $Pk_2, \text{ Pa}$ | |
| ასკანთიხა | 3,5 | 490,00 | 8,80 | 0,96 | 2,60 | 19,50 |
| | 2,0 | 1700,00 | 3,30 | 2,40 | 2,72 | 14,10 |
| მოდიფიცირებული ასკანთიხა | 3,5 | 22,00 | 0,43 | 0,30 | 0,75 | 1,30 |
| | 2,0 | 161,00 | 1,41 | 2,00 | 3,75 | 1,24 |

რეოლოგიური კვლევების მიხედვით ლითონკომპლექსებით და სელემეთიონინით მოდიფიცირებული ასკან-თიხის 8% სუსპენზია შეიძლება მიეკუთვნოს მყარი, სუსტი სტრუქტურის მქონე სისტემას, დამახასიათებელი პირობითი სტატიკური და დინამიური დენადობის ზღვრის მნიშვნელობებით.

ამრიგად, ანტიანემიური დანიშნულების ასკან-თიხის კომპოზიციური მყარი მოდიფიკაცია სტრუქტურისწარმოქმნის და რეოლოგიური თვისებების მიხედვით პასუხობს სამკურნალო საშუალებების მიმართ წაყენებულ მოთხოვნებს.

ავტორები მადლობას უცხადებენ შოთა რუსთაველის სახელობის ეროვნულ სამეცნიერო ფონდს გრანტის პროექტის #FR/436/6-480/14 დაფინანსებისათვის, რის ფარგლებშიც ჩატარდა ეს კვლევები.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Карпуть И.М., Николадзе М.Г. Диагностика и профилактика алиментарной анемии у поросят / Ветеринария, 2003, №4, с. 34 – 37.
2. Буров А.В., Тен Э.В. Анемия молодняка свиней / Ветеринария сельскохозяйственных животных, 2007, № 10, с. 45-49.
3. Калетина И.И., Калетин Г.И. Микроэлементы - биологические регуляторы. Наука в России , 2007, №1, с. 21-26.
4. Smits R.I. and Herman D.J. 2000 Practical experiences with Bioplexes in intensive pig production in; Biotechnology in the Feed industry Press, Nottingham, NK. Pp. 293-300
5. ც. გაბელია, ლ. ჯაფარიძე, ე. სალუქვაძე, ს. უროტაძე, რკინა- ფრუქტოზის კომპლექსის მიღება და კვლევა . საქართველოს მეცნიერების ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2008, ტ. 34, გვ. 401-403
6. Круглицкий Н.Н. Очерки по физико химической механике, Киев: “Наукова думка”, 1988, 220с.

INVESTIGATION OF PHYSICAL-CHEMICAL PROPERTIES OF THE MODIFIED ASKAN-CLAY

Leila Japaridze, Tsiala Gabelia, Eter Saluqvadze, Nana Osipova, Tamar Kvernadze, Ketevan Ebralidze
*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry,
Ivane Javakhishvili Tbilisi State University*

SUMMARY

Peroral solid form of Askan-Clay modified by synthesized Fe(II), Co(II), Zn(II), Cu(II), Mn(II) fructose complexes and selenmethionene has been received for animal treatment/prevention. Physical and chemical properties, structure forming ability and rheological features of modified forms have been studied. All revealed properties meet requirements for drugs.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОЙ АСКАН-ГЛИНЫ

Л.К.Джапаридзе, Ц.С.Габелиа, Э.Ш.Салуквадзе, Н.А.Осипова, Т.К.Квернадзе, К.Г.Эбралидзе
Институт физической и органической химии им. П. Г. Меликишвили Тбилисского государственного университета им. Ив. Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Модифицированием аскан-глины комплексами Fe(II), Co(II), Zn(II), Cu(II), Mn(II) с фруктозой (с добавлением селенметионина) приготовлено порошкообразное лечебно-профилактическое средство перорального применения, предназначенное для сельскохозяйственных животных. Изучены физико-химические свойства полученной модификации, определены её структурообразующие и реологические параметры. Установлено, что по данным свойствам модификация соответствует требованиям, предъявляемым к соединениям медицинского назначения.

НЕКОТОРЫЕ КОМПОНЕНТЫ СТЕБЛЕЙ *Yucca gloriosa* L.

М.М.Бенидзе, В.Г.Небиеридзе, А.В.Схиртладзе, Э.П.Кемертелидзе, М.Ганцера*

ТГМУ Институт Фармакохимии им. И. Г. Кутателадзе, 0159 Тбилиси, ул. П. Сараджиишвили
36, Грузия, e-mail: ether_kemertelidze@yahoo.com

*Институт Фармации, Департамент Фармакогнозии, Университета Иннсбрук,
Иннраин 80-82, Иннсбрук, Австрия

Из стеблей *Yuccagloriosa*L. – юкки славной, интродуцированной в промышленном масштабе в Грузии, выделены и идентифицированы 3-О-β-D-глюкопиранозидкофейной кислоты и три стероидные гликозиды – фураностаноловый гликозид производный смилагенина и спиростаноловые гликозиды сарсасапогенина и вилагенина с химическим строением 25(R) 5β-фураностан-3β,22α,26-триол 3-О-β-D-глюкопиранозил-(1→2)-О-β-D-галактопиранозил 26-О-β-D-глюкопиранозид, 25(S)5β-спиростан-3β-ол-3-О-β-D-глюкопиранозил-(1→2)-О-β-D-галактопиранозид и новое соединение 25(S)5β-спиростан-3β-ол-12-он 3-О-β-D-глюкопиранозил-(1→2)-О-β-D-галактопиранозид. Структуры выделенных веществ были установлены классическими физико-химическими методами и современным спектральным анализом с помощью моно- и двухмерным ЯМР (¹H, ¹³C, HSQC, HMBC, COSY) и масс-спектрологии (ESI/MS).

Стероидный сапогенин – тигогенин из листьев *Yuccagloriosa*L. – юкки славной был признан рентабельным исходным продуктом для синтеза стероидных гормональных препаратов [1-2]. С целью обеспечения производство тигогенина растительным сырьем в Восточной Грузии были разведены плантации юкки славной на 400 га площади [3]. При изучении химического состава интродуцированного растения из листьев, цветков, плодов, стеблей и корневищ были выделены более 50 спиростаноловые, фураностаноловые и холестаноловые гликозиды. Среди них до 20 новых соединений. Подсохшие на нижних ярусах живого растения листья, состоящие в основном из спиростаноловых гликозидов, являются источником предполагаемого фунгицидного препарата «глюриофуцина»[4]. На основе стероидных гликозидов цветков разработан препарат под названием «Алексин» – эффективный стимулятор роста и развития сельскохозяйственных культур [5]. Корни, кора корневищ и стеблей оказались богатыми фенольными соединениями. Из них выделены стильбены с редкой спироструктурой, обладающие высокой антиоксидантной и антипролиферативной активностью [6].

Юкка славная образует мощные стебли, которые составляют 30-35% массы всего растения. В предыдущие годы из стеблей были выделены стероидные сапогенины – смилагенин, тигогенин, гекогенин и неогитогенин, а также спиростаноловый гликозид-юккалоезид А[7].

В данном сообщении приводятся новые данные состава стеблей растения.

Стебли юкки славной были собраны на Тбилисском опытном участке лекарственных растений Института Фармакохимии им. И. Г. Кутателадзе в июле 2014 г.

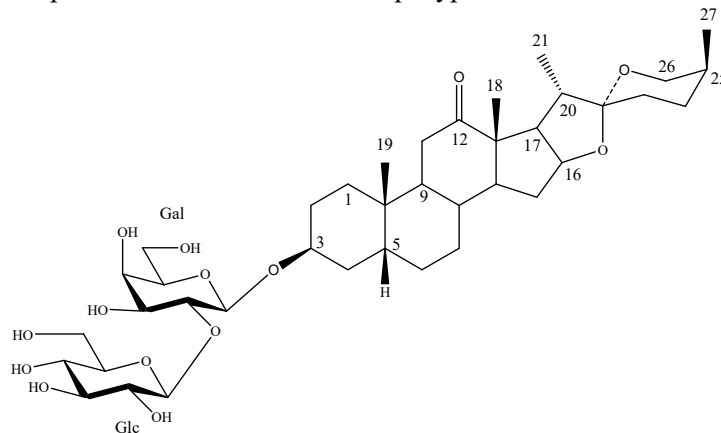
300 г в/с сырья извлекали 70% метанолом при температуре кипения растворителя. Из экстракта спирт отгоняли и водную жидкость очищали хлороформом, переносили на колонке DiaionHP-20 и элюировали градиентной системой H₂O-MeOH- 10:0→0:10, получены 4 фракции по 500 мл каждый. Из водного элюата после отгонки растворителя остался твердый остаток 75.1 г, 30% MeOH - 1.7 г, 80% MeOH - 10.2 г и MeOH - 1.1 г. Из остатков хроматографированием на колонке SephadexLH-20, а затем с силикагелем изолированы четыре индивидуальное вещество: вещество **1** - 10 мг, **2** - 6 мг, **3** - 5 мг, **4** - 7 мг.

Структуры веществ установлены с помощью моно- и двухмерным ЯМР (¹H, ¹³C, HSQC, HMBC, COSY) и масс-спектрологии (ESI/MS). Один из них (**3**) оказался новым, а три (**1**, **2**, **4**) известными соединениями идентифицированными как 3-О-β-D-глюкопиранозид кофейной кислоты (**1**) [8], 25(R) 5β-фураностан-3β,22α,26-триол 3-О-β-D-глюкопиранозил-(1→2)-О-β-D-галактопиранозил 26-О-β-D-глюкопиранозид (**2**) [9], 25(S)5β-спиростан-3β-ол-3-О-β-D-глюкопиранозил-(1→2)-О-β-D-галактопиранозид (**4**) [10].

В спектре ¹H ПМР вещества **3** видны сигналы четырех метильных групп δ 1.08 (3H, с, Me-18), 0.99 (3H, с, Me-19), 1.04 (3H, д, J=6.7, Me-21), 1.10 (3H, д, J=6.7, Me-27), двух протонов вторичной алкогольной функции δ 4.08 (1H, м, H-3), 4.34 (1H, м, H-16), двух метилен протонов δ 3.93 и 3.29 (по

одной 1H, м, H-26a,b), и двух аномерных протонов δ 4.40 (1H, д, J=7.9, H-1 Gal), 4.66 (1H, д, J=7.5, H-1 Glc). ^{13}C ЯМР спектр показывает сигналы двухвторичных алкольных функции δ 76.0(C-3) и 80.5 (C-16) и одной первичной δ 65.9 (C-26), что указывает наспиростаноловое строение гликозида (таблица 1). S конфигурация при C-25 установлена разницей химических сдвигов между протонами H2-26(Δ ab=0.64 ppm). Сигналы спектров ^1H и ^{13}C ЯМР δ 1.97 (1H, м, H-5) и δ 37.0 (C-5) указывают на 5 β ряд гликозида. Кетонная группа при C-12 доказана на HMBC спектре корреляционным пиком между δ 1.08 (3H, с, Me-18) и δ 215.8 (C-12). Таким образом, агликон представляет собой (25S) спиростан-3 β -ол-12-он или вилагенин[11]. Качественный и количественный состав углеводной части установлен спектрами COSY и HSQC, а последовательность их замещения HMBC спектром, где видны значительные корреляционные пики между аномерными протонами сахара и атомов углерода: δ 4.40 (H-1 Gal) и 76.0 (C-3 Agl), δ 4.66 (H-1 Glc) и δ 79.0 (C-2Gal).

Исходя из полученных данных, вещество 3 характеризуется как 25(S)5 β -спиростан-3 β -ол-12-он 3-O- β -D-глюкопиранозил-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-галактопиранозид. Гликозид производный вилагенина с таким набором моносахаридов ещё не описан в литературе и является новым соединением.



3

Данные ЯМР ^{13}C - и ^1H вещества 3 (CD₃OD, 600 MHz, δ в ppm, Jв Hz)

| Атом C | δ (C) | δ (H) | Атом C | δ (C) | δ (H) |
|--------|--------------|------------------------|----------------|--------------|-----------------------------|
| 1 | 30.7 | 1.56-1.34 (м) | β -D-Gal | | |
| 2 | 27.6 | 1.45-1.19 (м) | 1 | 101.4 | 4.40 (д, J=7.9) |
| 3 | 76.0 | 4.08 (м) | 2 | 79.0 | 3.84 (дд, J=8.5, 7.9) |
| 4 | 30.9 | 1.86-1.54 (м) | 3 | 75.0 | 3.68 (дд, J=8.5, 2.9) |
| 5 | 37.0 | 1.97 (м) | 4 | 70.2 | 3.84 (дд, J=2.9, 1.2) |
| 6 | 27.3 | 1.92-1.43 (м) | 5 | 76.2 | 3.48 (м) |
| 7 | 27.0 | 1.55-1.42 (м) | 6 | 62.2 | 3.75 (дд, J=12.0, 2.0) |
| 8 | 35.7 | 2.03 (м) | | | 3.70 (дд, J=12.0, 4.5) |
| 9 | 43.2 | 1.86 (м) | β -D-Glc | | |
| 10 | 36.7 | - | 1 | 104.3 | 4.66 (д, J=7.5) |
| 11 | 38.4 | 2.45-2.07 (м) | 2 | 76.0 | 3.20 (дд, J=9.0, 7.5) |
| 12 | 215.8 | - | 3 | 77.7 | 3.37 (дд, J=9.0, 9.0) |
| 13 | 56.4 | - | 4 | 71.8 | 3.25 (дд, J=9.0, 9.0) |
| 14 | 57.5 | 1.23 (м) | 5 | 78.1 | 3.28 (ддд, J=9.0, 4.5, 2.0) |
| 15 | 31.7 | 2.15-1.51 (м) | 6 | 62.9 | 3.84 (дд, J=12.0, 2.0) |
| 16 | 80.5 | 4.34 (дд, J=14.5, 7.5) | | | 3.67 (дд, J=12.0, 4.5) |
| 17 | 54.8 | 2.49 (м) | | | |
| 18 | 16.3 | 1.08 (с) | | | |
| 19 | 24.3 | 0.99 (с) | | | |
| 20 | 43.2 | 1.79 (м) | | | |
| 21 | 13.5 | 1.04 (д, J=6.7) | | | |
| 22 | 110.8 | - | | | |
| 23 | 29.7 | 1.62-1.43 (м) | | | |
| 24 | 26.8 | 1.44-1.34 (м) | | | |
| 25 | 28.4 | 1.68 (м) | | | |
| 26 | 65.9 | 3.93-3.29 (м) | | | |
| 27 | 16.2 | 1.10 (д, J=6.7) | | | |

ლიტერატურა – REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. Э. П. Кемертелидзе, Т. А. Пхеидзе. Тигогенин из юкки славной – возможное сырье для синтеза стероидных гормональных препаратов. Хим. фарм. журнал, 1972, 6, 12, 44-47
2. Н. М. Меньшова, Г. В. Гриненко, Н. Н. Суворов, Ю. Р. Гуревич, Э. П. Кемертелидзе, Т. А. Пхеидзе. О получении 16 α -метил-5 α -прегнандиол-3 β ,17 α ,-она-20 – полупродукта синтеза дексаметазона. Хим. фарм. журнал, 1974, 7, 15-17
3. Э. П. Кемертелидзе, Т. А. Пхеидзе. Стероидные соединения некоторых растений произрастающих в Грузии, Тбилиси, Мецниереба, 1993, 183 с.
4. Э. П. Кемертелидзе, М. М. Бенидзе, А. В. Схиртладзе. Стероидные соединения *Yuccagloriosa*L., интродуцированной в Грузии и их применение, Хим. фарм. журнал, 2009, 43, 1, 27-29
5. E. Kemertelidze, M. Benidze. Steroidal glycosides of *Yucca gloriosa* and their influence on plant growth. Bull. Georg. Acad. Sci., 2001, 164, 91-93
6. C. Bassarello, G. Bifulco, P. Montoro, A. Skhirtladze, M. Benidze, E. Kemertelidze, C. Pizza, S. Piacente. *Yucca gloriosa*: A source of phenolic derivatives with strong antioxidant activity. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2007, 55, 6636-6642
7. М. М. Бенидзе, А. В. Схиртладзе, Э. П. Кемертелидзе. Стероидные соединения стеблей *Yuccagloriosa*. Хим. природ.соедин. 2012, 3, 464-465
8. V. A. Kurkin, G. G. Zapesochnaya, A. G. Dubichev, E. D. Vorontsov, I. V. Aleksabdrova, R. V. Panova. Phenylpropanoids of a callus culture of *Rhodiolarosea*. Chemistry of Natural Compounds, 1991, 25, 4, 419-425
9. A. Skhirtladze, A. Plaza, P. Montoro, M. Benidze, E. Kemertelidze, C. Pizza, S. Piacente. Furostanolsaponins from *Yucca gloriosa* L. rhizomes. Biochemical systematics and ecology, 2006, 34, 809-814
10. В. И. Гришкорец, П. А. Карпов, С. И. Иксанова, В. Я. Чирва. Стероидный гликозид из семян *Yuccamacrocarpa*. Хим. природ.соедин. 1998, 6, 828-829
11. K. E. Kenney, M. E. Wall. Steroidal sapogenins. Willagenin, a new steroidal 12-keto sapogenin. The journal of Organic Chemistry, 1957, 22, 4, 468-469.

***Yucca gloriosa* L. ღეროების ზოგიერთი კომპონენტი**

მ.ბენიძე, ვ.ნებერიძე, ა.სხირტლაძე, ე.ქემერტელიძე, მ.განცერა*

თსუიოველ ქუთათელაძის ფარმაკოქიმიის ინსტიტუტი, 0159 თბილისი, პ. სარაჯიშვილის 36, საქართველო
*ფარმაკოგნოზის დეპარტამენტი, ფარმაციის ინსტიტუტი, ინსბრუკის უნივერსიტეტი, ინრაინის 80-82, ინსბრუკი, ავსტრია

რეზიუმე

საქართველოში სამრეწველო მასშტაბით ინტროდუცირებული *Yucca gloriosa* L. - იუკა დიდებულის ღეროებიდან გამოყოფილი და იდენტიფიცირებულია ყავის მჟავის 3-O- β -D-გლუკოპირანოზიდი და სამი სტეროიდულიგლიკოზიდი - სმილაგენინის ნაწარმი ფუროსტანოლური, სარსასაპოგენინის და ვილაგენინის სპიროსტანოლური გლიკოზიდები: 25(R) 5 β -ფუროსტან-3 β ,22 α ,26-ტრიოლ 3-O- β -D-გლუკოპირანოზილ-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-გალაქტოპირანოზილ 26-O- β -D-გლუკოპირანოზიდი, 25(S) 5 β -სპიროსტან-3 β -ოლ 3-O- β -D-გლუკოპირანოზილ-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-გალაქტოპირანოზიდი და ახალი ნივთიერება 25(S) 5 β -სპიროსტან-3 β -ოლ-12-ონ 3-O- β -D-გლუკოპირანოზილ-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-გალაქტოპირანოზიდი. ნივთიერებათა სტრუქტურები დადგენილიაკლასიკური ფიზიკურ-ქიმიური მეთოდებით და თანამედროვე სპექტრული ანალიზების ერთ- და ორგანოზომილებიანი ბმრ (¹H, ¹³C, HSQC, HMBC, COSY) და მას-სპექტროსკოპიის (ESI/MS) გამოყენებით.

SOME COMPONENTS OF *Yucca gloriosa* L. STEMS

M.M.Benidze, V.G.Nebieridze, A.V.Skhirtladze, E.P.Kemertelidze, M.Ganzera*

IovelKutateladze Institute of Pharmacochemistry, 36 P. Sarajishvilist., 0159 Tbilisi, Georgia

*Institute of Pharmacy, Pharmacognosy, University of Innsbruck, Innrain 80 - 82, 6020 Innsbruck, Austria

SUMMARY

From the stems of *Yucca gloriosa*, introduced in Georgia in the industrial scale, are isolated and identified 3-O- β -D-glucopyranosidecaffeic acid and three steroidal glycosides – furostanolic glycoside derivative of smilagenin and spirostanolic glycosides derivatives of sarsasapogenin and willagenin with chemical structures: 25(R) 5 β -furostan-3 β ,22 α ,26-triol 3-O- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-galactopyranosyl 26-O- β -D-glucopyranoside, 25(S) 5 β -spirostan-3 β -ol3-O- β -Dglucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-galactopyranoside andnew compound 25(S) 5 β -spirostan-3 β -ol-12-one3-O- β -D –glucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)-O- β -D-galactopyranoside. The structures of isolated compounds were established by classical physical, chemical methods and modern spectral analysis mono- and bidimensional NMR (¹H, ¹³C, HSQC, HMBC, COSY) and mass-spectroscopy (ESI/MS) data.

ქიმიური ტექნოლოგია

ქ. ბათუმის საკანალიზაციო სისტემის რეაბილიტაციის გავლენა წყალარინების ბაზემენდი ნაბეობის მუშაობის ეფექტურობაზე

მარინე გვიანიძე, ევგენია შენგელია, ლერი გვასალია

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ქ. ბათუმის საკანალიზაციო სისტემის ნაწილობრივი რეაბილიტაციის შედეგად წყალარინების გამწმენდ ნაგებობაზე უცხო წყლების შემოდინება შემცირებულია, რაც განაპირობებს ჩამდინარე წყლების ორგანული ნაერთებით დატვირთვის მეტადზრდას შეწონილ ნაწილაკებთან შედარებით. ეს პოზიტიურად აისახება წყლის ბიოლოგიური გაწმენდის ეფექტურობაზე და შესაბამისად, გაწმენდილი წყლის ზღვაში ჩაშვების სანიტარული ნორმების უზრუნველყოფაზე. ნაგებობაზე შემომავალი ჩამდინარე წყლების ხარისხის მაჩვენებლების სტატისტიკური ანალიზის საფუძველზე გამოკვეთილია კორელაციური დამოკიდებულება შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების შემცველობასა და ანაერობული აუზებიდან გამავალ წყალში ჟანგბადის ქიმიური მოხმარების (ჟქმ) ღონეთა შორის.

შავი ზღვის აჭარის სანაპირო ზოლის ეკოლოგიური მდგომარეობის გაუმჯობესების მიზნით ბათუმში 2012 წლიდან ფუნქციონირებს საკანალიზაციო წყლების გამწმენდი ნაგებობა, სადაც ხდება ბათუმიდან და მიმდებარე სოფლებიდან (ახალსოფელი, გონიო, კვარიათი, სარფი) მიღებული ჩამდინარე წყლების მექანიკური და ბიოლოგიური გაწმენდა. მექანიკური გაწმენდა ითვალისწინებს გაცხრილვას, ქვიშისა და ცხიმის გამოყოფას და შლამის დალექვას პირველად და მეორად სალექტრებში. ბიოლოგიური გაწმენდა მიმდინარეობს მწვეთავ ფილტრებზე და ითვალისწინებს ნიტრიფიკაციას, ნახშირწყლების, ცილების და ცხიმების რედუცირებას. წყალი მეორად სალექტრებში საბოლოო გაწმენდის შემდეგ ჩაედინება შავ ზღვაში 40 მ. სიღრმეზე.

ლიტერატურიდან [1-3] ცნობილია, რომ ჩამდინარე წყლების გაწმენდის ეფექტურობის და შესაბამისად ზღვაში ჩაშვების სანიტარული ნორმების უზრუნველსაყოფად, ნაგებობაზე შემომავალი წყალი დატვირთული უნდა იყოს ორგანული და ბიოგენური ნივთიერებებით. რაც უფრო მეტია ჩამდინარე წყალში ორგანული ნაერთების და ბიოგენების შემცველობა, მით მეტია წყლის გაწმენდის ეფექტურობა, რადგან ბიოლოგიური გაწმენდის განყოფილებაში ეს ნივთიერებები წარმოადგენენ ბაქტერიების საკვებს. ორანული ნაერთების და ბიოგენების ნაკლებობა იწვევს ბაქტერიების მეტაბოლიზმის შეწყვეტას და საბოლოოდ სიცოცხლისუნარიანობის შეწყვეტას, რაც უარყოფითად აისახება წყლის გაწმენდის ხარისხზე. ამავ ეფექტურობის მონაცემების თანახმად ბიოლოგიური გაწმენდის მაღალეფექტურობის უზრუნველსაყოფად საჭიროა ჩამდინარე წყლებში დაბინძურების მაჩვენებლების ცვლილება ცხრილში 1 მოცემულ ფარგლებში.

ცხრილი 1. ჩამდინარე წყლების დატვირთვა ბიოლოგიური გაწმენდის მაღალეფექტურობის უზრუნველსაყოფად

| პარამეტრი | ჟქმ | უმბა* | NH ₄ | საერთო ფოსფორი | საერთო აზოტი |
|-----------|---------|---------|-----------------|----------------|--------------|
| მგ/ლ | 400–600 | 200–400 | 20-50 | 8–12,5 | 20–50 |

*უმბ – ჟანგბადის ბიოლოგიური მოხმარება

ცხრილში 1 მოცემული მაჩვენებლების ასეთი მნიშვნელობები არ არის უზრუნველყოფილი ყველა გამწმენდ ნაგებობაზე. ჩამდინარე წყლის დატვირთვა დამოკიდებულია იმაზე, თუ რა ღონით ხვდება საკანალიზაციო სისტემაში უცხო წყლები. თუ მათი რაოდენობა მაღალია, მაშინ წყალი განზავდება და შესაბამისად, ჩამდინარე წყლის ორგანული ნაერთებით და ბიოგენებით დატვირთვა შემცირებულია.

ბათუმის გამწმენდ ნაგებობაზე შემომავალი ჩამდინარე წყალი მეტნაკლებად გაზავებულია უცხო წყლებით, რასაც ადასტურებს ცხრილში 2 მოცემული ტექნოლოგიური რეგლამენტით გათვალისწინებული მაჩვენებლების სისტემატური ლაბორატორიული ანალიზების შედეგები.

ცხრილი 2. ქ. ბათუმის წყალარინების გამწმენდ ნაგებობაზე შემომავალი ჩამდინარე წყლების საშუალო დატვირთვა 2014-2015 წლებში

| წელი | შეწონილი ნაწილაკები, მგ/ლ | ჟქმ, მგ/ლ | ჟბმ, მგ/ლ | NH ₄ , მგ/ლ | საერთო ფოსფორი, მგ/ლ | საერთო აზოტი, მგ/ლ |
|------|---------------------------|-----------|-----------|------------------------|----------------------|--------------------|
| 2014 | 114 | 190 | 97 | 10,5 | 3,9 | 16 |
| 2015 | 130 | 225 | 107 | 12,6 | 4,4 | 19 |

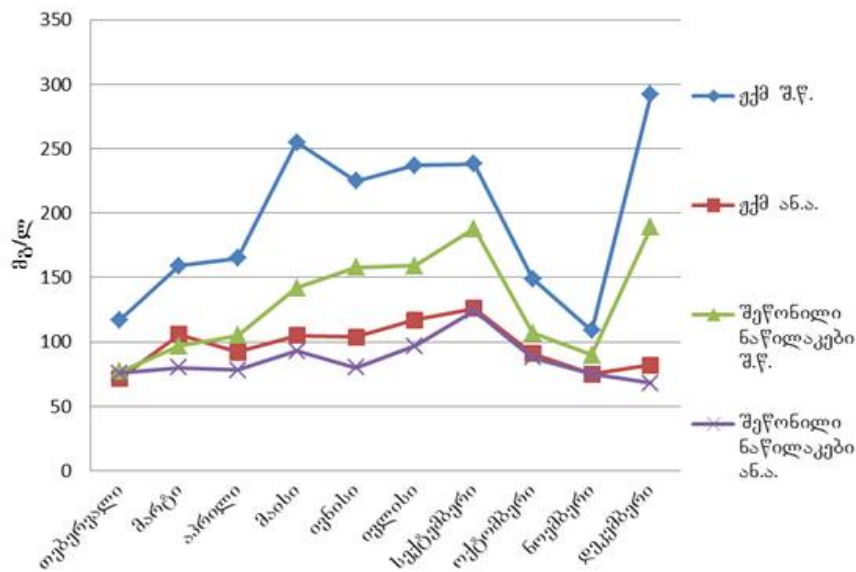
ნაგებობაზე შემომავალი ჩამდინარე წყლების სათანადო დატვირთვის უზრუნველსაყოფად ამჟამად მიმდინარეობს საკანალიზაციო სისტემის რეაბილიტაცია, რომელიც სავარაუდოთ უნდა დასრულდეს 2018 წელს.

წინამდებარე კვლევის მიზანია ქ.ბათუმის საკანალიზაციო სისტემის ნაწილობრივი რეაბილიტაციის გავლენის შეფასება ჩამდინარე წყლის დატვირთვის ზრდაზე და შესაბამისად, წყლის გაწმენდის ეფექტურობაზე.

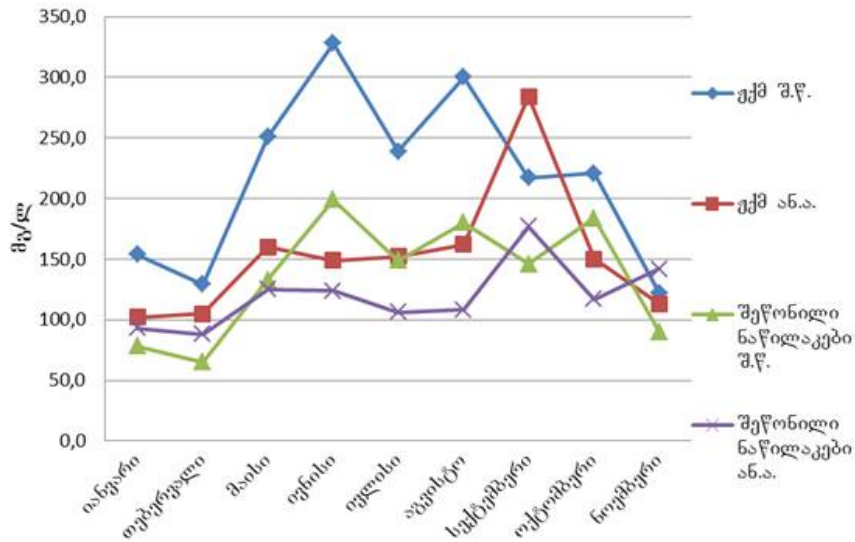
ნაგებობაზე შემომავალი ჩამდინარე წყლის გაწმენდის მნიშვნელოვანი ეტაპია მისი პირველად სალექტრებში გაწმენდა. ბათუმის გამწმენდ ნაგებობაზე პირველად სალექტრების როლს ასრულებენ ანაერობული აუზები, სადაც მიმდინარეობს დალექილი პირველადი შლამის ცივი სტაბილიზირება. პირველად სალექტრებში ილექება შეწონილი ნაწილაკები და მცირდება ჟქმ-ჟბმ-ის მნიშვნელობები. ჟქმ-ჟბმ-ის შემცირების დონე პირველად სალექტრებში, მნიშვნელოვნად მოქმედებს მწვეთავ ფილტრებზე მიმდინარე ნიტრიფიკაციის პროცესზე და შესაბამისად, წყლის გაწმენდის ეფექტურობაზე.

ლიტერატურიდან [3,4] ცნობილია, რომ პირველად სალექტრებში ჟქმ-ჟბმ-ის შემცირება შეადგენს 20-40%. თუ პირველად სალექტრებში ჟქმ-ჟბმ უფრო მეტად მცირდება, მაშინ ბიოლოგიური გაწმენდის სტადიაზე მიკროორგანიზმები განიცდიან საკვების დეფიციტს, რაც იწვევს ნიტრიფიკაციის პროცესის შეფერხებას.

ბათუმის გამწმენდ ნაგებობაზე შემომავალ წყლებში და ანაერობულ აუზებში ჟქმ-ჟბმ ცვლილების დინამიკის ანალიზმა 2014-2015 წლებში გვაჩვენა, რომ ანაერობულ აუზებში ჟქმ-ჟბმ - შემცირება საშუალოდ 50% შეადგენს და მათი შემცირების ხარისხი დამოკიდებულია შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების რაოდენობაზე. 2014-2015 წლებში ჟქმ-ის დონის შემცირების დამოკიდებულება შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების რაოდენობაზე მოცემულია დიაგრამაზე 1,2.

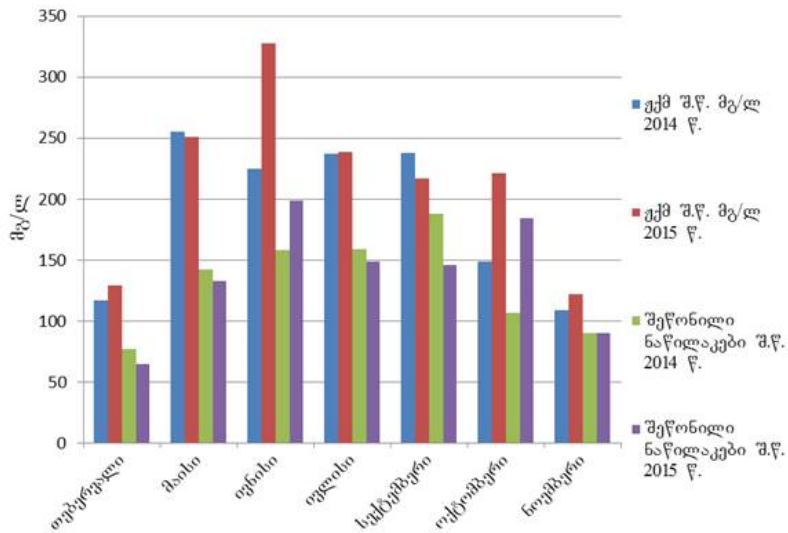


ნახ. 1. შემომავალ წყალში და ანაერობულ აუზებში ჟქმ-ის და შეწონილი ნაწილაკების ცვლილების დინამიკა 2014 წელს



ნახ. 2. შემომავალ წყალში და ანაერობულ აუზებში ქმ-ის და შეწონილი ნაწილაკების ცვლილების დინამიკა 2015 წელს

როგორც დიაგრამებიდან ჩანს 2015 წელს ანაერობული აუზებიდან გამავალ წყალში ქმ-ის დონე უფრო მაღალია ვიდრე 2014 წელს. ეს ერთი მხრივ განპირობებულია შემომავალ წყალში ქმ-ის ზრდით და ასევე იმით, რომ შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების რაოდენობა 2014 წელთან შედარებით იგივე დონეზე ან მცირედ მომატებულია (დიაგრამა 3). ასეთ ვითარებაში შეწონილ ნაწილაკებზე ორგანული და არაორგანული ნივთიერებების აღსორცია ნაკლებად მიმდინარეობს და წყალში ქმ-ს შემცირება ნაკლებია.



ნახ. 3. შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების და ქმ-ის ცვლილების დინამიკა 2014-2015 წლებში.

შემომავალ წყლებში ქმ-ის და შეწონილი ნაწილაკების შემცველობის ცვლილება ზემოაღნიშნულ ფარგლებში აისახება ანაერობულ აუზში მიმდინარე პროცესებზე. მაგალითად, 2015 წელს ქმ-ის შემცირების დონე ანაერობულ აუზში უფრო ნაკლებია და იგი არ აღემატება 55%, როცა 2014 წელს ქმ-ის შემცირება ცალკეულ შემთხვევაში 70% აღწევდა. ეს კი უარყოფითად აისახებოდა მწვეთავ ფილტრებზე მიმდინარე ნიტრიფიკაციის პროცესზე.

2014-2015 წლების მონაცემების მათემატიკური ანალიზის შედეგად მიღებულია მაღალიკორელაციური კავშირი ($r=0.950512$) შემომავალ წყალში შეწონილ ნაწილაკების რაოდენობასა

და ანაერობულ აუზებში ჟქმ-ის ცვლილებათა შორის. რაც უფრო დაბალია შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების შემცველობა, მით უფრო მცირეა ანაერობულაუზში ჟქმ-ის შემცირების დონე და პირიქით, რაც უფრო მაღალია შემომავალ წყალში შეწონილი ნაწილაკების რაოდენობა, მით მეტია ჟქმ-ის შემცირების დონე ანაერობულ აუზებში. ეს კი გამოწვეულია შეწონილ ნაწილაკებზე ჟქმ-ის განმსაზღვრელი არაორგანული და ორგანული ნივთიერებების სორბციის ხარისხით.

ჩატარებულმა კვლევამ გვაჩვენა, რომ 2015 წელს ადლიის წყალარინების გამწმენდ ნაგებობაზე შემომავალი წყლის ორგანული ნაერთებით დატვირთვა 2014 წელთან შედარებით გაზრდილია, რაც უზრუნველყოფს ბიოლოგიური გაწმენდის ეტაპზე ნიტრიფიკაციის პროცესის ინტენსიფიკაციას და შესაბამისად, ჩამდინარე წყლების გაწმენდის ხარისხს.

ლიტერატურა - REFERENCES - ЛИТЕРАТУРА

1. Klärwertertaschenbuch. H. Felber, M. Fischer. F. Hirthammer Verlag, München/Oberhaching, 2010, 438 p.
2. Handbuch fuer Umwelttechnische Berufe. E. Stier, H-C. Baumgart, M. Fischer. F. Hirthammer Verlag GmbH. 2003, 542 p.
3. Воронов Ю. В. Водоотведение и очистка сточных вод : учебник. — изд. 4-е, доп. и перераб.. — М.: Изд-во Ассоциации строительных вузов, 2006. — 702 с.
4. Очистка сточных вод от взвешенных веществ и неорганических примесей. — М.: НИЦ «Глобус», 2007. — Т. 1. — 81 с.

INFLUENCE OF REHABILITATION OF SEWERAGE SYSTEMS OF BATUMI AND THE EFFICIENCY OF THE WASTEWATER TREATMENT PLANT OF ADLIA

Marine Gvianidze, Evgenia Shengelia, Leri Gvasalia
Georgian technical University

SUMMARY

Through the rehabilitation of the sewerage system of Batumi the infiltration of waste water is decreased. This causes more increasing the organic loading of wastewater then the suspended solids. This have a positive influence on biological treatment process and the discharge limits into the sea is ensured. As a result of the statistical analysis of wastewater quality, indicators revealed the correlation relationship between the content of suspended solids in the water inflow the treatment and the level of chemical oxygen demand (COD) after first sedimentation tanks.

ВЛИЯНИЕ РЕАБИЛИТАЦИИ КАНАЛИЗАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ г. БАТУМИ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАБОТЫ АДЛИЙСКОЙ ОЧИСТНОЙ СТАНЦИИ СТОЧНЫХ ВОД

М.Д.Гвианидзе, Е.Г. Шенгелия, Л.И. Гвасалия
Грузинский технический университет

РЕЗЮМЕ

Реабилитация канализационной системы г. Батуми сказывается на уменьшение количества посторонних сточных вод поступающих на очистную станцию. Это обуславливает больший рост органической нагрузки сточных вод, чем количества взвешенных веществ. В свою очередь это позитивно влияет на повышение эффективности биологической очистки и обеспечивает пределы допустимых концентраций спуска сточных вод в море. В результате статистического анализа показателей качества сточных вод, выявлена корреляционная зависимость между содержанием взвешенных веществ в воде поступающих на очистку и уровнем химического (ХПК) потребления кислорода после первичных отстойников.

**მადნეულის სამთო გამამდიდრებელ კომბინატში რეციკლირების პროცესის
ბამოქმენების შესაძლებლობა**

შალვა ანდლულაძე, გიორგი მჭედლიშვილი, ანა ბერეჟიანი
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

შემოთავაზებულია მადნეულის სამთო-გამამდიდრებელი კომბინატის მჟავე კარიერული წყლების გაწმენის ტექნოლოგია დამლექ აგენტად ნატრიუმის სულფიდის გამოყენებით, რომელიც მიიღება საწარმოს ტერიტორიაზე დასაწყობებული ნედლეულის – ბარიტების გადაამუშავებით. ამ რეაგენტით მიიღწევა ღრმა გაწმენდა, ამასთან მძიმე მეტალების ილექტიან სულფიდების სახით და უზრუნველყოფს დამატებით სულფიდური კონცენტრატის მიღებას.

ნარჩენების რეციკლირების პროცესი ანუ გადაამუშავება, ნარჩენების მართვის თანამედროვე ტექნოლოგიების მთავარ კომპონენტად ითვლება და გულისხმობს ნარჩენების ტექნოლოგიურ გადაამუშავებას.

ნარჩენებით გარემოს დაბინძურების პრობლემა განსაკუთრებით მწვავედ დგას მადნეულის სამთო-გამამდიდრებელ კომბინატში (მსგკ), სადაც მადნეულის საბადოს ბარიტო-პოლიმეტალური მადნის ღია წესით მოპოვებისა და გადაამუშავებისას, ატმოსფერული ნალექის და გრუნტის წყლების ზემოქმედებით წარმოიქმნება კარიერული წყალი. ამ უკანასკნელის მთის ქანებთან კონტაქტისას ხდება იონური გაცვლა. ქანებში პირიტის და ქალკოპირიტის არსებობის და ჰაერის ჟანგბადის და თიონური ბაქტერიების ზემოქმედების გამო, საბადოზე წარმოიქმნება მჟავე კარიერული წყლები (მკწ). მკწ შედგენილობა და დებიტი ფართო ფარგლებში მერყეობს, კლიმატური პირობების და წლის სხვადასხვა დროის მიხედვით. თავის შედგენილობით მკწ მიეკუთვნება სულფატური კლასის მარილიან წყლებს. მისი საშუალო წლიური დებიტი შეადგენს 1 მლნ. მ³. ცხრილში 1. მოტანილია მკწ ქიმიური ანალიზის შედეგები.

ცხრილი 1. მადნეულის სამთო-გამამდიდრებელი კომბინატის მჟავე კარიერული წყლების ქიმიური შედგენილობა, მგ/ლ

| №№ | pH | Cu | Zn | Fe | Pb | Co | Ni | Cd |
|----|-----|------|------|-----|------|------|-------|------|
| 1. | 2.8 | 940 | 828 | 432 | 0.52 | 1.17 | 0.950 | 2.85 |
| 2. | 2.8 | 954 | 817 | 475 | 0.54 | 1.19 | 0.854 | 2.37 |
| 3. | 2.7 | 1026 | 1003 | 326 | 0.48 | 1.11 | 0.930 | 1.83 |
| 4. | 2.6 | 1032 | 938 | 329 | 0.59 | 1.02 | 0.810 | 1.72 |
| 5. | 2.7 | 776 | 676 | 465 | 0.67 | 1.07 | 0.770 | 1.65 |
| 6. | 2.6 | 811 | 612 | 421 | 0.59 | 1.51 | 0.630 | 1.43 |

ასეთი წყლები დამაბინძურებელი ნივთიერებების შემცველობის მიხედვით (საერთო რაოდენობა 2-5 გ/ლ) მიეკუთვნება საშუალოდ კონცენტრირებულ აგრესიულ ხსნარებს.

მკწ ფიზიკურ-ქიმიური მახასიათებლები მიუთითებს მათი შედგენილობის მერყეობის ფართო დიაპაზონზე, რაც განაპირობებს გაწმენდის ოპტიმალური მეთოდის ზუსტად შერჩევის აუცილებლობას.

მკწ-ს რთული და ცვალებადი შედგენილობა, რომელიც ამავე დროს ხასიათდება დიდი მოცულობებით, საკმაოდ ართულებს გაწმენდის ისეთი ფართოდ გავრცელებული მეთოდების გამოყენებას, როგორებიცაა: მემბრანული ტექნოლოგია, იონიტების გამოყენება, ელექტროქიმიური მეთოდები და სხვა.

ზემოაღნიშნულის გათვალისწინებით, მკწ-ს გასაწმენდად, როგორც ყველაზე ეფექტური და იაფი, არჩეული იყო რეაგენტული მეთოდი.

მოცემულ ეტაპზე მსგკ მკწ გასაწმენდად გამოიყენება კირი. რსებული ტექნოლოგია მოიცავს შემდეგ სტადიებს; მკწ ამოტუმბვას, ნაყარის ქვეშ ლოკალიზაციას, საცავებში შეყვანებას (მოცულობა 5 000 მ³), აქტიური რკინის ფხვნილით ცემენტაციას, ფილტრაციას, ჩაუმქრალი კირით ნეიტრალიზაციას და ნალექის მოთავსებას საცავში. ნეიტრალიზებული და დაწმენდილი წყალი გამოიყენება სგკ-ის საჭიროებისათვის.

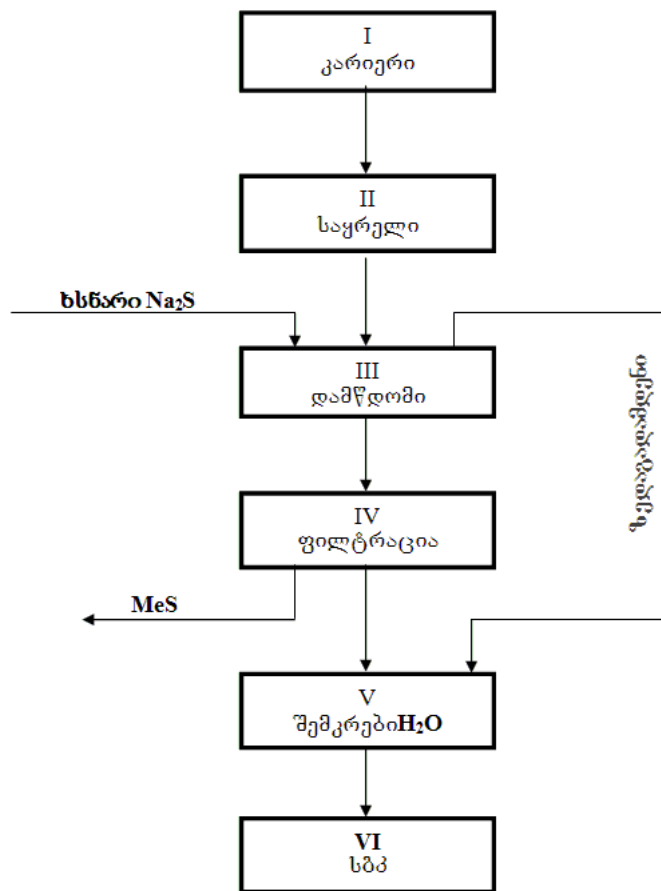
ასეთი გაწმენდის ნაკლოვანებას წარმოადგენს დიდი რაოდენობით ძნელად გამოსაშრობი შლამის წარმოქმნა, რომელიც არ ექვემდებარება დაყოფას. შესაბამისად, მისი სამრეწველო გამოყენება გართულებულია და ამიტომ არხორციელდება. გაწმენდის სქემაში გამოიყენება რეაგენტი (აქტივიზირებული რკინის ფხვნილი), რომელიც ქვეყანაში არ იწარმოება და რომლის მიწოდება ქმნის დამატებით ტექნიკურ პრობლემებს.

გაწმენდილი წყალი შეიცავს კალციუმის მარილების დიდ რაოდენობას, მისი გამოყენება საბრუნ წყალმომარაგებაში გართულებულია.

უფრო ღრმა გაწმენდა მიიღწევა მკვ-ს დამუშავებისას სულფიდებით (BaS, Na₂S, (NH₄)₂S). ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ მძიმე ლითონების სულფიდების ხსნადობა გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე ნებისმიერი სხვა ძნელად ხსნადი ნაერთების (ჰიდროქსიდების, კარბონატების - ცხრილი 2).

ცხრილი 2. მსგვ მკვ შემავალი ჰიდროქსიდების და სულფიდების ხსნადობის ნამრავლი

| №№ | კათიონები | ნაერთები | | ხსნადობის ნამრავლი | |
|----|------------------|---------------------|--------------------------------|-----------------------|-----------------------|
| | | ჰიდროქსიდები | სულფიდები | ჰიდროქსიდები | სულფიდები |
| 1. | Cu ²⁺ | Cu(OH) ₂ | CuS | 5.1·10 ⁻²⁰ | 8.5·10 ⁻⁴⁵ |
| 2. | Zn ²⁺ | Zn(OH) ₂ | ZnS | 7.1·10 ⁻¹⁸ | 1.6·10 ⁻²⁴ |
| 3. | Fe ²⁺ | Fe(OH) ₂ | FeS | 1.6·10 ⁻¹⁴ | 3.7·10 ⁻¹⁹ |
| 4. | Fe ³⁺ | Fe(OH) ₃ | Fe ₂ S ₃ | 1.1·10 ⁻³⁶ | 1.2·10 ⁻⁸⁸ |
| 5. | Pb ²⁺ | Pb(OH) ₂ | PbS | 1.1·10 ⁻²⁰ | 3.4·10 ⁻²⁸ |
| 6. | Cd ²⁺ | Cd(OH) ₂ | CdS | 2.3·10 ⁻¹⁴ | 3.6·10 ⁻²⁹ |
| 7. | Co ²⁺ | Co(OH) ₂ | CoS | 1.6·10 ⁻¹⁸ | 3.1·10 ⁻²³ |
| 8. | Ni ²⁺ | Ni(OH) ₂ | NiS | 2.0·10 ⁻¹⁵ | 1.4·10 ⁻²⁴ |



ნახ. 1. მკვ-ს გაწმენდის შემოთავაზებული ტექნოლოგიური სქემა

ნახ. 1 წარმოდგენილია მკვ გაწმენდის ტექნოლოგიური სქემა, დამლექის სახით სულფიდის შემცველი რეაგენტის გამოყენებით, რომლის მიღება ხორციელდება დასაწყობებული ნედლეულის – ბარიტის ნაყარის - გადამუშავებით. ამ მარაგის რაოდენობა შეადგენს 1,8 – 2 მლნ. ტ., რომლის გადამუშავება მთლიანად უზრუნველყოფს მკვ-ს გაწმენდას სკკ ფუნქციონირების მთელი დროის განმავლობაში.

შემოთავაზებული ტექნოლოგიის ძირითად პლიუსებს წარმოადგენს:

- მკვ-ს ღრმა გაწმენდა;
- ფასეული კომპონენტების უტილიზაცია;
- წყლის რესურსების რაციონალური გამოყენება.

ლიტერატურა -REFERENCES – ЛИТЕРАТУРА

1. ანდლულაძე შ., ბერეჟიანი ა. მადნეულის სამთო-გამამდიდრებელი კომბინატის მჟავა კარიერული წყლების გაწმენდის ტექნოლოგიის დამუშავება. “ინტელექტუალი” 2008 №6, გვ. 85-89
2. ანდლულაძე შ., ბერეჟიანი ა. სპილენძის ამოღების ტექნოლოგია სამთო მომპოვებელი მრეწველობის ტექნოლოგიური წყლებიდან. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2008 №2, ტომი 34 გვ. 221-224.
3. ანდლულაძე შ., მჭედლიშვილი გ., ბერეჟიანი ა. მადნეულის სამთო-გამამდიდრებელი კომბინატის მჟავა კარიერულ წყლებში მეტალების დალექვის პირობების შესწავლა. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2009 №3, ტომი 35, გვ. 59-61

THE OPORTUNITY TO USE OF THE RECYCLING PROCESS AT MADNEULI ORE-PROCESSING PLANT

Shalva Andguladze, Giorgi Mchedlishvili, Ana Berejiani

SUMMARY

The technology of treatment of acid quarry waters at Madneuli mining and processing plant using sodium sulfide as a precipitation reagent is proposed. Reaches deep cleaning, besides heavy metals precipitate as sulphides, that ensures obtaining additional sulphide concentrate.

ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОЦЕССА РЕЦИКЛИРОВАНИЯ В МАДНЕУЛСКОМ ГОРНО-ОБОГАТИТЕЛЬНОМ КОМБИНАТЕ

Ш.Н.Андгуладзе, Г.С.Мчедлишвили, А.М.Бережиани

РЕЗЮМЕ

Предложена технология очистки кислых карьерных вод Маднеулского горно-обогатительного комбината применением сульфида натрия в качестве осадительного реагента. Достигается глубокая очистка, тяжелые металлы осаждаются в виде сульфидов, чем обеспечивается получение дополнительного сульфидного концентрата

ვაშლის კანიდან ფლავონოლების, ტრიტერპენოიდებისა და პექტინის საფეხურებრივი
ექსტრაქციები

მზია ციცაგი, მარიამ ჩხაიძე, მირანდა ხაჩიძე, მანანა ბუზარიაშვილი,
ქეთევან ებრალიძე, ვლადიმერ ციციშვილი

*ივ. ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
პეტრე მელიქიშვილის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი*

ცნობილია, რომ საკვებ რაციონში ხილისა და ბოსტნეულის წილის მნიშვნელოვნად გაზრდა ეფექტურია მსოფლიოში ყველაზე მეტად გავრცელებული ისეთი დაავადებების პრევენციისთვის, როგორც არის გულსისხლძარღვთა დაავადებები და კიბო. ვაშლი ერთერთი ყველაზე გავრცელებული და მოხმარებადი ხილია არა მარტო საქართველოში, არამედ მსოფლიოში და წარმოადგენს მრავალი ბიოაქტიური ნივთიერების წყაროს ადამიანისთვის. ამასთან, მას აქვს კარგად დაბალანსებული შემადგენლობა, გამოირჩევა ბოჭკოს მაღალი შემცველობით და დაბალი კალორიულობით. ვაშლი შეიცავს მრავალ ვიტამინს, 60-მდე სხვადასხვა ფენოლურ ნაერთს, ლიპოფილურ ტრიტერპენოიდებს და სხვადასხვა მინერალებს. ამ ბიოაქტიური ნივთიერებების მნიშვნელოვანი ნაწილი განთავსებულია კანში.

ვაშლის კანი, ვაშლის წვენი და სხვა საკვებ პროდუქტად გადამუშავების ნარჩენია და წარმოადგენს ბიოაქტიური ნივთიერებების იაფ წყაროს. ვაშლის კანში შემავალ ბიოაქტიურ ნივთიერებებს გააჩნია ანტიოქსიდანტური და ანტიკანცეროგენული მოქმედება და დადებითად მოქმედებს ადამიანის ჯანმრთელობაზე, ამიტომ მნიშვნელოვანია ამ აგროინდუსტრიული ნარჩენის გადამუშავების შესაძლებლობის შესწავლა. [1]

ფენოლური ნაერთები, ლიპოფილური ტრიტერპენოიდები და პექტინი ნაერთების ის კლასია, რომელთა შემცველობაც მნიშვნელოვნად ღიძობს კანში, ვიდრე მთლიან ნაყოფში.

მცენარეული მატრიცებიდან ბიოაქტიური ნივთიერებების ექსტრაქციისთვის შესაფერისი ტექნიკის შერჩევა დამოკიდებულია საექსტრაქციო ნივთიერებების კლასზე, ექსტრაქტისათვის საჭირო ხარისხსა და გამოსავალზე, პროცესის პირობებზე და პროცესის გაფართოების ეკონომიკურ შესაძლებლობაზე.

აქედან გამომდინარე, ვაშლის კანის გადამუშავებისთვის ჩვენს მიერ შერჩეული იქნა ისეთი მოწინავე ექსტრაქციის მეთოდები, როგორცაა ულტრაბგერითი და სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქციის მეთოდები.

უკანასკნელ წლებში გაიზარდა ულტრაბგერითი(უბ) მეთოდის გამოყენება მცენარეული მატრიცებიდან ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების ექსტრაქციების გაადვილებისა და დაჩქარებისთვის. ეს ტექნიკა განსაკუთრებით ეფექტურია ექსტრაქციის ტრადიციულ მეთოდებთან შედარებით, რადგან ის ხელს უწყობს უჯრედის გახლეჩას და მიზნობრივი მოლეკულების ურთიერთქმედებას გამხსნელთან დაბალ ტემპერატურაზე. მეთოდი ასევე უზრუნველყოფს ექსტრაქციის დროისა და ენერგოდანახარჯების მკვეთრ შემცირებას, ზრდის გამოსავალს და ამცირებს თერმული დეგრადაციის ეფექტს. ექსტრაქციის ეს მეთოდი არის სწრაფი, იაფი, მარტივი და გამოირჩევა მაღალი რეპროდუქციულობით.

სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქცია (სფე) არის კრიტიკული წერტილის ზემოთ აირების გაზრდილ გამხსნელუნარიანობაზე დაფუძნებული დაყოფის მოწინავე ტექნოლოგია. ყველაზე ხშირად გამოყენებული ფლუიდი CO_2 .

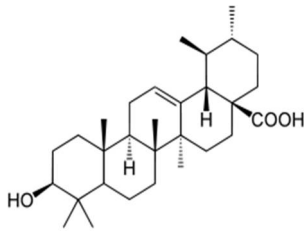
მეთოდი არის ეკოლოგიურად მეგობრული და სწრაფი. ოპერატიული პარამეტრების შერჩევით მიიღწევა მაღალი სელექტურობა, რაც უზრუნველყოფს მიზნობრივი პროდუქტის მაღალ ხარისხს. საფეხურებრივი ექსტრაქციების განხორციელება შესაძლებელია სტანდარტულ სამრეწველო დანადგარზე.

კვლევის მიზანს წარმოადგენდა გამშრალი ვაშლის კანიდან ფლავონოლების (კვერცეტინი და კვერცეტინ გლიკოზიდები), პენტაციკლური ტრიტერპენოიდების (ურსოლის და ოლევანოლის მჟავები), პექტინის თანმიმდევრული, საფეხურებრივი ექსტრაგირება, როგორც ულტრაბგერითი, ასევე სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქციის მეთოდის გამოყენებით.

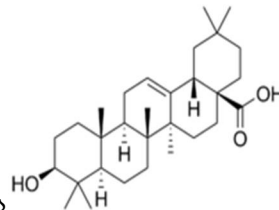
პოლიფენოლებიდან ვაშლის კანში ყველაზე დიდი შემცველობით არის კვერცეტინი და კვერცეტინ-3-გლიკოზიდები (გლუკოზიდი, გალაქტოზიდი, არაბინოზიდი, ქსილოზიდი და რამნოზიდი)[2]

კვერცეტინი და კვერცეტინ გლიკოზიდები არიან ფიზიოლოგიურად აქტიური ფლავონოლ მოლეკულები, რომლებსაც მიეწერება მრავალი ჯანმრთელობისთვის სასარგებლო თვისება.

ვაშლის კანი შეიცავს მნიშვნელოვანი რაოდენობით ლიპოფილურ ტრიტერპენოიდებს, რომლებიც კონცენტრირებულია კანში და გამოირჩევიან ანტიკანცეროგენული აქტივობით. ვაშლის კანში ყველაზე მეტად გავრცელებული ტრიტერპენოიდებია ურსოლის და ოლეანოლის მჟავები. ისინი წარმოადგენენ იზომერებს და მათი დაცილება საკმაოდ რთულია.



ურსოლის მჟავა



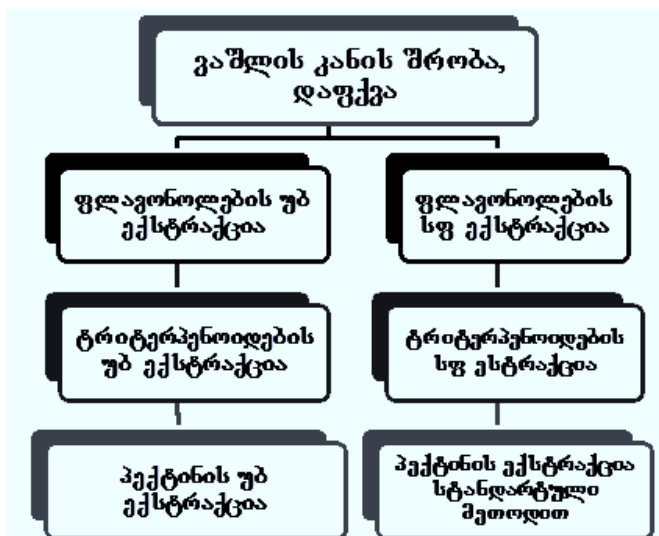
ოლეანოლის მჟავა

ვაშლის კანი ასევე შეიცავს გარკვეული რაოდენობით პექტინს, რომლის ექსტრაქციისთვისაც გამოვიყენეთ *ჰს, შარბასა ანილ გუბტას* [3] მიერ შემუშავებული მეთოდის ულტრაბგერითი ექსტრაქციისთვის მოდიფიცირებული ვარიანტი.

შესწავლილი და დამუშავებული იქნა ზემოთ ჩამოთვლილი ნაერთების თანმიმდევრული საფეხურებრივი ექსტრაქციები, როგორც სუპერკრიტიკული ფლუიდების, ასევე ულტრაბგერითი ექსტრაქციის მეთოდების გამოყენებით. ორივე მეთოდს აქვს თავისი უპირატესობები და ნაკლოვანებები.

მეთოდის შერჩევა დამოკიდებულია იმაზე, თუ რა მოთხოვნებია წაყენებული მიზნობრივი პროდუქტის მიმართ. ასევე, რომელი ინდუსტრიული დანადგარია ხელმისაწვდომი კონკრეტული ბიზნეს პროექტისთვის.

ვინაიდან სუპერკრიტიკული ექსტრაქციების დროს შესაძლებელია რამდენიმე პარამეტრის ცვლილება, ოპტიმალური პირობების შერჩევით ულტრაბგერით ექსტრაქციასთან შედარებით მიღწეული იქნა ბევრად უკეთესი სელექტიურობა და შესაბამისად მიღებული იქნა მიზნობრივი პროდუქტები, ბიოაქტიური ნივთიერებების მაღალი შემცველობით. განსაკუთრებით ურსოლისა და ოლეანოლის მჟავას შემთხვევაში. ორივე მეთოდი სწრაფია, მაგრამ ულტრაბგერითი ექსტრაქციის მეთოდი ბევრად იაფია.



პექტინის ულტრაბგერითი ექსტრაქცია ბევრად სწრაფია, ასევე არ საჭიროებს გაუფერულების სტადიას და ტემპერატურა 25⁰C–ია, რაც 75⁰C–ით ნაკლებია ვიდრე ზემოთ აღნიშნულ მეთოდისა.

ექსპერიმენტი

ნედლეული: ვაშლი “გოლდენი” შექენილი იქნა ადგილობრივ მარკეტში, გაიფუძვინა და გაშრა აირლუმელში 40-50°C-ზე და დაიფუძვა ელექტრო საფუძვავში.

ულტრაბგერითი ექსტრაქცია:

ეტაპი 1

ულტრაბგერითი ექსტრაქციის პირველ ეტაპზე 10გ დაფუძვილ ვაშლის კანს ემატება 100მლ აცეტონი (მშრალი მასა/გამხსნელი შეფარდებით 1:10). ექსტრაქცია მიმდინარეობს მუდმივი მორევის პირობებში. ულტრაბგერის მოქმედება (20kHz), დრო— 60წთ, ტემპერატურა—25-27°C. ექსტრაქციის დამთავრების შემდეგ ხსნარი ორთქლდება როტორულ ამორთქლებელზე მთლიანი მოცულობის მეთაედამდე. ხსნარი ემატება ცინულიან წყალს და ხდება კვერცეტინ გლიკოზიდების ნარევის დალექვა. გამოსავალი 220მგ/100გ-ია გამშრალ ვაშლის კანზე გადაანგარიშებით.

თხელფენოვანი ქრომატოგრაფიის ელუენტი— ტეტრაჰიდროფურანი/მეთილის სპირტი/წყალი 1:3:0.5

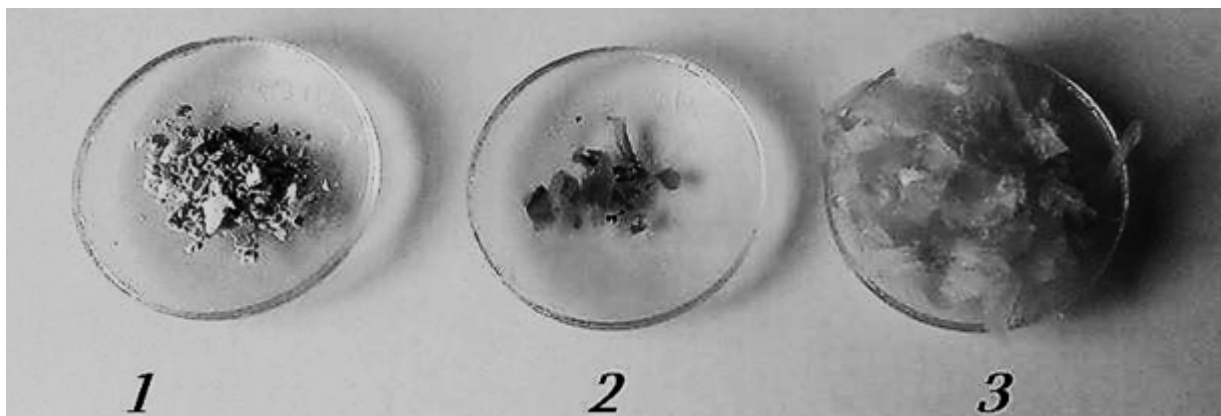
ეტაპი 2

ულტრაბგერითი ექსტრაქციის მეორე ეტაპზე დარჩენილ ნედლეულს ემატება 100მლ 96%- იანი ეთილის სპირტი (მშრალი მასა/გამხსნელი შეფარდებით 1:10). ექსტრაქცია მიმდინარეობს მუდმივი მორევის პირობებში. ულტრაბგერის მოქმედება— (20kHz), დრო— 60წთ, ტემპერატურა 25-27°C. ექსტრაქციის დამთავრების შემდეგ ხსნარი ორთქლდება როტორულ ამორთქლებელზე მთლიანი მოცულობის მეთაედამდე. ხსნარი ემატება ცინულიან წყალს. მიღებული ნალექი შეიცავს პენტაციკლურ ტრიტერპენოიდებს ურსოლისა და ოლეანოლის მჟავების სახით. საერთო გამოსავალი 510მგ/100გ-ია მშრალ ვაშლის კანზე გადაანგარიშებით.

თხელფენოვანი ქრომატოგრაფიის ელუენტი პეტროლეუმის ეთერი/ეთილ აცეტატი/ჭიანჭველის მჟავა თანაფარდობით 8.2:1.8:0.1 ურსოლის მჟავას Rf=0.15 ოლეანოლის მჟავას Rf=0.31

ეტაპი 3

შემდგომ ეტაპზე ხდება პექტინის ულტრაბგერითი ექსტრაქცია. მეორე ეტაპზე დარჩენილ ნედლეულს ემატება 0.05M HCl მოცულობით მშრალი მასა/გამხსნელი 1:10. ექსტრაქცია მიმდინარეობს მუდმივი მორევის პირობებში ულტრაბგერის მოქმედება— (20kHz), დრო— 60წთ, ტემპერატურა— 60°C. პექტინის დალექვა ხდება ეთანოლით. შემდეგ შრება 50°C-ზე და იფუძვება. გამოსავალი 5.6%.



1. კვერცეტინისა და კვერცეტინ გლიკოზიდების ნარევი
2. ურსოლისა და ოლეანოლის მჟავების ნარევი
3. პექტინი

სუპერკრიტიკული ფლუიდებით ექსტრაქცია:

ეტაპი 1

25გ ვაშლის დაფუძვილი კანი თავსდება ავტოკლავში. როდესაც სისტემაში წნევა აღწევს 140-150 ატმ-ს, იწყება თანაგამხსნელის (აცეტონი) მიწოდება მოცულობითი წილით 6%. საექსტრაქციო ტემპერატურა— 40-50°C. წონასწორული დრო —30წთ. დინამიური დრო— 1სთ. მიღებული ხსნარი

აორთქლდა როტორულ ამორთქლებელზე მშრალ მასამდე. კვერცხინ გლიკოზიდების ჯამური გამოსავალი 19.6მგ/100გ-ია ვაშლის კანის მშრალ მასაზე გადაანგარიშებით.

ეტაპი 2

ნედლეულის გადმოტვირთვის გარეშე ხდება თანაგამსხნელის ეთანოლის მიწოდება მოცულობითი წილით 6-7%. ოპერატიული წნევა—250ატმ. ტემპერატურა—50⁰C. წონასწორული დრო 30წთ. დინამიური დრო 1სთ. ექსტრაქციის დამთავრების შემდეგ ხსნარი ორთქლდება როტორულ ამორთქლებელზე მშრალ მასამდე. ნალექი შეიცავს პენტაციკლურ ტრიტერპენოიდებს ურსოლისა და ოლეანოლის მუკავების სახით. საერთო გამოსავალი—700მგ/100გ მშრალ მასაზე დაგანგარიშებით.

ეტაპი 3

პექტინის გამოყოფა მოხდა ზემოთ აღწერილი მეთოდიკით.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Kelly Wolfe, Xianzhong Wu, and Rui Hai Liu. Antioxidant activity of apple peel. Agriculture and Food chemistry. 2003, 51, pp. 609-614
2. Rosa T.S. Frigetto, Rodolfo M. Welendorf, Eduardo N. Nigro, Nelson Frigetto, Antonio C. Siani Isolation of ursolic acid from apple peel by high speed counter- current chromatography Food Chemistry. Vol 106 2008 pp. 767-771
3. PC Sharma, anil Gupta and PKaushal. Optimization of method for extraction of pectin from apple pomace. Indian Journal of natural products and Resources Vol. 5(2), June 2014 pp 184-189.

SEQUENTIAL EXTRACTION OF FLAVONOLS, TRITERPENOIDS AND PECTIN FROM APPLE PEEL

Mzia Tsitsagi, Mariam Ckhaidze, Miranda Khachidze, Manana Buzariashvili, Ketevan Ebralidze, Vladimer Tsitsishvili

Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry at Iv. Javakhishvili Tbilisi State University

SUMMARY

Work describes the methods of sequential supercritical fluid extraction and ultrasound extraction of flavonols (major constituents – quercetin glycosides), pentacyclic triterpenoids (major constituents – ursolic and oleanolic acids), and pectin from apple peel, which is generated from apple juice processing industry. The choice of the suitable technique depends on: quality and yield required for target products, the process conditions and economic feasibility for scaling up the process. Supercritical fluid extraction provides high selectivity, while ultrasonic extraction method is much cheaper.

СТУПЕНЧАТАЯ ЭКСТРАКЦИЯ ФЛАВОНОЛОВ, ТРИТЕРПЕНОИДОВ И ПЕКТИНА ИЗ КОЖУРЫ ЯБЛОК

Мзия Цицаги, Мариам Чхаидзе, Миранда Хачидзе, Манана Бузариашвили, Кетеван Эбралидзе, Владимир Цицишвили

Институт физической и органической химии им. П.Г.Меликишвили Тбилисского государственного университета им.Ив.Джавахишвили

РЕЗЮМЕ

Описан метод ступенчатой экстракции ультразвуком и суперкритическими флюидами флавонолов (в основном гликозидов кверцетина), пентациклических тритерпеноидов (в основном урсоловой и олеанолиевой кислот) и пектина из кожуры яблок, полученных при производстве яблочных соков. Выбор удобного метода определяется качеством и выходом целевых продуктов, условиями процесса и экономической целесообразностью (экономической возможностью расширения процесса). Экстракция суперкритическими флюидами обеспечивает более высокую селективность, хотя экстракция ультразвуком гораздо дешевле.

ბარომემბრანების ოპტიმალური პარამეტრების დადგენით მცენარეული ექსტრაქტების ფილტრაციის ინტენსივობის გაზრდა

რ.გოცირიძე, ნ.მხეიძე, ს.მხეიძე, ნ.მეგრელიძე, ი.ჩხარტიშვილი
ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის აგრარული და მემბრანული ტექნოლოგიების კვლევითი ინსტიტუტი

მემბრანების გამოყენებით ფილტრაციას მიმართავენ თერმოლაბილური ნივთიერებების ხსნარებიდან მიკროორგანიზმების, მათი სპორების და ცხოველმყოფელობის პროდუქტების ოცილების მიზნით. ჩვენს მიერ დამზადებულ ლაბორატორიულ მიკროფილტრაციულ მოდულზე ჩავატარეთ კომპის ფოთლის, გვირილის ყვავილის, ეკალიპტის, ასკილის ნაყოფის, კრაზანის, პიტნის, მოცვის ნაყოფის, მაცვალის ფოთლის სპირტ და წყალხსნარების ექსტრაქტების ფილტრაცია. ყველა შემთვევაში სრულადმოვახდინეთმემბრანის წარმადობის აღდგენა სხვადასხვა ქიმ. რექტივებით, რაც წინაპირობაა იმისა, რომ ჩვენს მიერ დამზადებული მემბრანებიდან შესაძლებელია დამზადდეს მიკროფილტრაციული დანადგარები და დაინერგოს ფარმაცევტულ წარმოებებში ბიოაქტიური ნაერთების შემცველი ფარმპრეპარატების ფილტრაციისათვის.

ბიოპრეპარატების ფილტრაციისას მემბრანის მასალის გამოცდა და ფილტრაციის რეიტინგის (ფორების ზომების) შერჩევა ლაბორატორიულ პირობებშიყოველი კონკრეტული შემთხვევისათვის ძალიან მნიშვნელოვანია საწარმოო ფილტრაციის პროცესის პროგნოზირებისათვის[1,2].

კვლევის ობიექტს წარმოადგენდა ჩვენს მიერ მოდიფიცირებული ფთოროპლასტური მემბრანა (ფორების ზომა 0,11 მკმ), რომელიც გამოყენებული იქნა სხვადასხვა მცენარეული ექსტრაქტების გასაფილტრად.

ფთოროპლასტის მემბრანა მიიღება პოლიტეტრაფთორეთილენის ფხვიერი პოლიმერის ფხვნილის შეცხობით. შემდგომ ავსკის ფორმირება ხდება ექსტრუზირებით და კალანდრირებით [3].

სხვა მასალებთან შედარებით ფტოროპლასტს აქვს მრავალი უპირატესობა, რომელთა შორის უმთავრესია მდგრადობა მრავალჯერადი დასველება- შრობის, გამორეცხვის და რეგენერაციის, აგრესიული სითხეების მიმართ. ფთოროპლასტი ბიოლოგიურად უსაფრთხოა და ვარგისია საკვებ პროდუქტებისა და წამლების წარმოებაში გამოსაყენებლად.

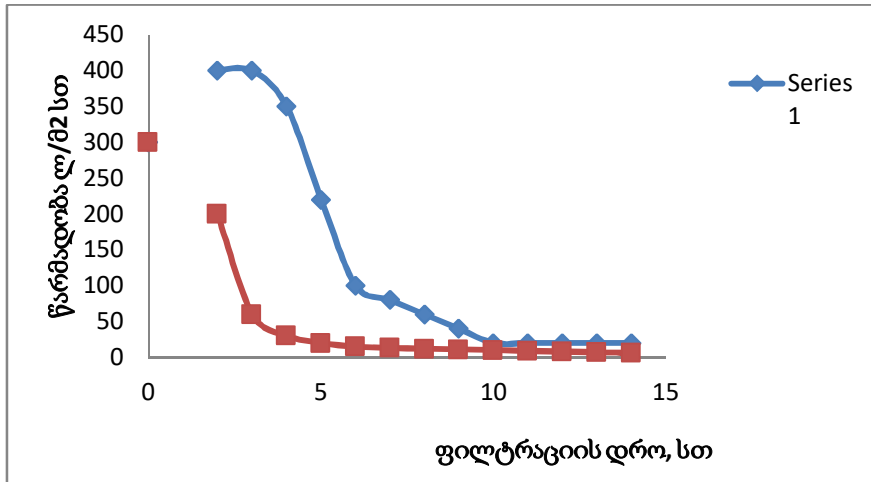
ფთოროპლასტური მემბრანის მახასიათებლები არ იცვლება 135°C-ზე ავტოკლავირებით სტერილიზაციის პირობებში. ფილტრი მდგრადია სხვადასხვა (ქიმიური და ჰიდროდინამიური) მეთოდებით რეგენერაციის დროს.

კვლევის მიზანს წარმოადგენდა მცენარეული ექსტრაქტების მიკროფილტრაციის პროცესის შესწავლა, ფილტრაცია-რეგენერაციის ოპტიმალური პარამეტრების შერჩევა. ამ მიზნით ავიღეთ ჩვენს მიერ დამზადებული მიკროფილტრაციული მემბრანა, ფორის საშუალო ზომით 0,11 მკმ და მრავალჯერადად მოვახდინეთ მასზე სხვადასხვა მცენარეული ექსტრაქტების ფილტრაცია და შემდგომ გაჭუჭყიანებული მემბრანის რეგენერაცია.

ფილტრაცია წარმოებდა ლაბორატორიულ დანადგარში, რომელშიც წნევა იქმნებოდა კომპრესორის მეშვეობით. გასაფილტრი მცენარეული ექსტრაქტი მიეწოდებოდა მიკროფილტრაციულ უჯრედში (სამუშაო ფართი 0,01 მ²) მოთავსებულ ფთოროპლასტური მემბრანის ზედაპირზე, ხსნარის ტემპერატურაა 20-25°C, წნევა 1-1,2 ატმოსფერო.

გასაფილტრად მომზადდა 15 სხვადასხვა გამომშრალი მცენარის (ფოთლის, ნაყოფის, ან ყვავილის) წყლიანი და სპირტიანი ექსტრაქტი. სტატიაში განხილულია რამდენიმე ექსპერიმენტის შედეგი: მემბრანის წარმადობის ცვლილება ფილტრაციის პროცესში, ფილტრაციის შემდეგ გაბიდნული მემბრანის რეგენერაცია ქიმიური რეაგენტების ხსნარების გამოყენებით.

ფილტრაციის მნიშვნელოვან მახასიათებელს წარმოადგენს წარმადობა, რომელიც განისაზღვრება დროის ერთეულში, მემბრანის ზედაპირის ფართის ერთეულში გასული ფილტრატის მოცულობით. განვსაზღვრეთ დისტილირებული წყლის მიმართ მემბრანის საწყისი წარმადობა, რომელიც ტოლი იყო 300 ლ/მ²სთ-ის. მიკროფილტრაციულ მოდულზე გავატარეთ კომპის ფოთლის წყლიანი ექსტრაქტი. ნახ. 1-ზე ნაჩვენებია მემბრანის წარმადობის ცვლილება კომპის ფოთლის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს.

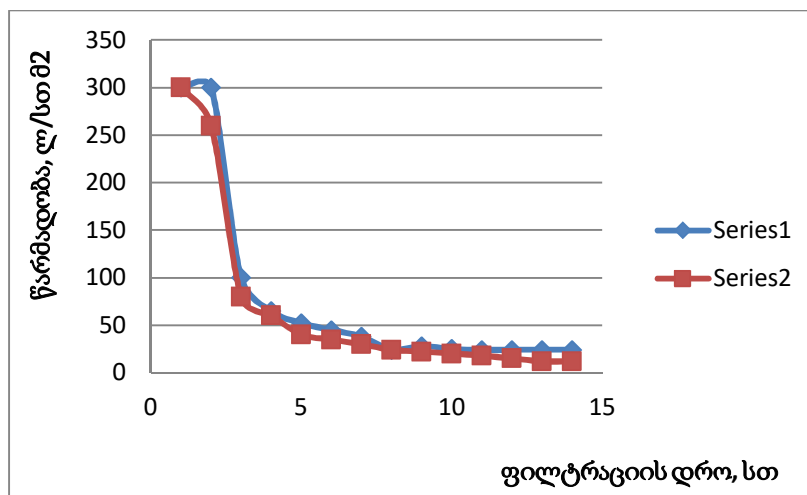


ნახ.1 მრუდი 1 -მემბრანის წარმადობის ცვლილება კომპის ფოთლის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს. მრუდი 2- მემბრანის წარმადობის ცვლილება კონცენტრატის ფილტრაციის დროს.

როგორც ნახ. 1-დან ჩანს, მოდულის 5 სთ-ის მუშაობის შემდეგ მემბრანის წარმადობა 20 - ჯერ შემცირდა (400 ლ/მ²სთ-დან 20 ლ/მ²სთ-მდე). შევწყვიტეთ ექსპერიმენტი და მოვახდინეთ მემბრანის რეგენერაცია. გაბინდული მემბრანის რეგენერაციისთვის გამოვიყენეთ სხვადასხვა კონცენტრაციის ტუტის ხსნარები. სრული რეგენერაციის შემდეგ უჯრედში კვლავ გავატარეთ ხსნარი, ამჯერად პირველი ფილტრაციის შემდეგ მიღებული კონცენტრატი.

მოდულის 5 საათის მუშაობის შემდეგ მემბრანის წარმადობა 40 - ჯერ შემცირდა (200 ლ/მ²სთ-დან 5ლ/მ²სთ-მდე). ეს შედეგები მოსალოდნელი იყო, რადგან კომპის წყლიანი ექსტრაქტის კონცენტრაციის გაზრდა იწვევს მემბრანის წარმადობის შემცირებას. ფილტრაციის შემდგომი გაგრძელება მიზანშეუწონელი იყო. შევწყვიტეთ ექსპერიმენტი და მოვახდინეთ მემბრანის რეგენერაცია წარმადობის სრულ აღდგენამდე ნატრიუმის ჰიდროქსიდით.

მემბრანის რეგენერაციის ჩატარების შემდეგ, ექსპერიმენტი ჩავატარეთ გვირილას ყვავილის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციაზე (იხ.ნახ.2)

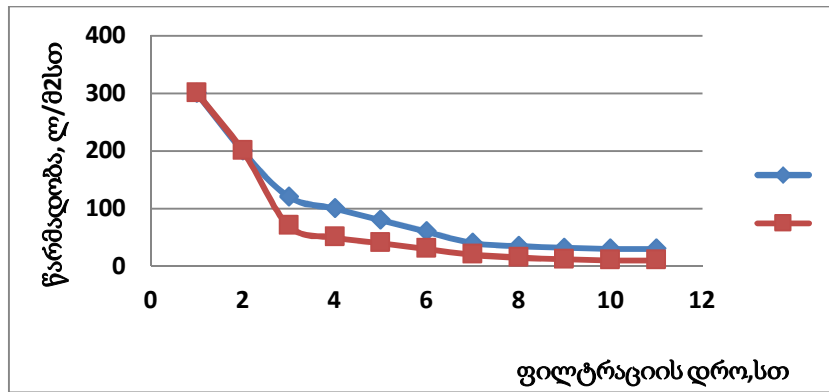


ნახ. 2. მრუდი 1 -მემბრანის წარმადობის ცვლილება გვირილის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს. მრუდი 2- მემბრანის წარმადობის ცვლილება კონცენტრატის ფილტრაციის დროს.

მოდულის 3 საათის მუშაობის შემდეგ მემბრანის წარმადობა 12 - ჯერ შემცირდა. შემდგომი 1 საათის მუშაობისას მემბრანის წარმადობა უცვლელი იყო-24 ლ/მ²სთ-ში. შევწყვიტეთ ექსპერიმენტი და მოვახდინეთ მემბრანის რეგენერაცია 3%-იანი მარილმჟავას ხსნარით. სრული რეგენერაციის შემდეგ

კვლავ გავატარეთ გვირილის ყვავილის ექსტრაქტი, განსხვავებით პირველი ფილტრაციისა მემბრანაში გავატარეთ პირველი ფილტრაციის შედეგად დაკონცენტრირებული ექსტრაქტი.

მემბრანის რეგენერაციის შემდეგ, იმავე მემბრანაზე ჩავატარეთ ექსპერიმენტი ევკალიპტის ფოთლის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციაზე (იხ. ნახ.3). მოდულის 3 საათის მუშაობის შემდეგ მემბრანის წარმადობა 7- ჯერ შემცირდა (200 ლ/მ²სთ-დან 30 ლ/მ²სთ-მდე). შემდგომი 0,5 საათის მუშაობისას მემბრანის წარმადობა უცვლელი იყო -30 ლ/მ².სთ-ში.

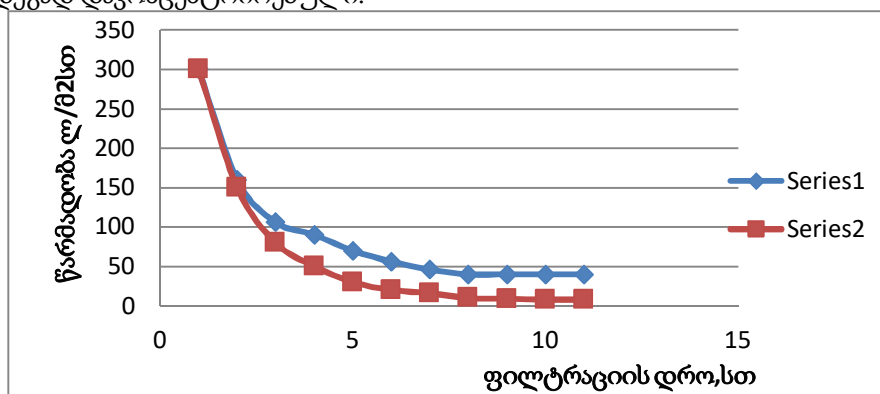


ნახ. 3. მრუდი 1 -მემბრანის წარმადობის ცვლილება ევკალიპტის ფოთლის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს. მრუდი 2- მემბრანის წარმადობის ცვლილება კონცენტრატის ფილტრაციის დროს.

შევწყვიტეთ ექსპერიმენტი და მოვახდინეთ მემბრანის რეგენერაცია ჯერ ტუტის ხსნარით, შემდეგ მჟავის ხსნარით ფილტრატის ნეიტრალურ რეაქციამდე. სრული რეგენერაციის შემდეგ კვლავ გავატარეთ ევკალიპტის ფოთლის ექსტრაქტი, განსხვავებით პირველი ფილტრაციისა, წყლიანი ექსტრაქტი გავატარეთ პირველი ფილტრაციის შედეგად დაკონცენტრირებული.

მემბრანის რეგენერაციის შემდეგ იმავე მემბრანაზე გავატარეთ ასკილის ნაყოფის წყლიანი ექსტრაქტი (იხ. ნახ. 4). მოდულის 2 საათის მუშაობის შემდეგ მემბრანის წარმადობა 4 - ჯერ შემცირდა. შემდგომი 2 საათის მუშაობისას მემბრანის წარმადობა უცვლელი იყო -40 ლ/მ².სთ-ში.

შევწყვიტეთ ექსპერიმენტი და მოვახდინეთ მემბრანის რეგენერაცია ანალოგიურად, როგორც ევკალიპტის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს. სრული რეგენერაციის შემდეგ კვლავ გავატარეთ ასკილის ნაყოფის წყლიანი ექსტრაქტი, ამ შემთხვევაშიც ექსტრაქტი გავატარეთ პირველი ფილტრაციის შედეგად დაკონცენტრირებული.



ნახ. 4. მრუდი 1 -მემბრანის წარმადობის ცვლილება ასკილის ნაყოფის წყლიანი ექსტრაქტის ფილტრაციის დროს. მრუდი 2- მემბრანის წარმადობის ცვლილება კონცენტრატის ფილტრაციის დროს.

ამგვარად, ჩავატარეთ კომპის ფოთლის, გვირილის ყვავილის, ევკალიპტის, ასკილის ნაყოფის, კრაზანის, პიტნის, მოცვის ნაყოფის, მაყვლის ფოთლის სპირტ და წყალხსნარების ექსტრაქტების ფილტრაცია.

ფთოროპლასტური მემბრანით (ფორების ზომა 0,11მკმ) ფილტრაციის შედეგად მივიღეთ გაკამკამებული და სტერილური ხსნარები. ხსნარების სიმღვრივის შესაფასებლად განვსაზღვრავდით

ტურბიდიმეტრით (Lovibond) სიმღვრივის მაჩვენებელს NTU-ს. მიკრობიოლოგიური ანალიზის შედეგები ადასტურებს გაფილტრული ხსნარების სტერილურობას.

მიღებული შედეგები გვიჩვენებს აგრეთვე, რომ ნებისმიერი ექსტრაქტის მემბრანული ტექნოლოგიით ფილტრაციამდე აუცილებელია მოხდეს წინასწარი ფილტრაცია მექანიკური ფილტრის გამოყენებით შეწონილი, შედარებით მსხვილი ფრაქციების მოსაცილებლად. ეს ზრდის მიკროფილტრაციული მემბრანებით ფილტრაციული ციკლის დროს.

თუ გამოვიყენებთ ფთოროპლასტურ მიკროფილტრებს ფარმაცევტულ წარმოებაში ფარმპრეპარატების გასაფილტრად ფინიშურ, ჩამოსხმის სტადიაზე, შესაძლებელი იქნება გავაერთიანოთ პრეპარატების წარმოების ორი მნიშვნელოვანი საფეხური-გაკამკამება და სტერილიზაცია.

ფთოროპლასტური მემბრანის მცირე სისქე (1მმ) უზრუნველყოფს დასამზადებელი ფილტრ-პატრონის კომპაქტურობას, ხოლო თერმო- და ქიმიური მდგრადობა მისი მრავალჯერადად გამოყენების საშუალებას იძლევა. ჩვენი აზრით კვლევის შედეგები საინტერესო უნდა იყოს ფარმაცევტული წარმოებებისათვის.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. Чуешов, В.И. Промышленная технология лекарств. Москва: НФАУ (2002)716 с.
2. Терентьев И.М. Как выбирать мембранный фильтр для стерилизующей фильтрации. (2009). Медицинский бизнес_www.medbusiness.ru.
3. Ulbricht M. Advanced functional polymer membranes. Polymer 47 (2006) pp 2217– 2262

ACCELERATION OF VEGETATIVE EXTRACTS FILTRATION RATE WITH DETERMINATION OF THE OPTIMAL PARAMETERS OF BAROMEMBRANES

Raul Gotsiridze, Nino Mkhaidze, Svetlana Mkhaidze, Nargiz Megrelidze, Iamze Chkhartishvili
Agrarian and Membrane Technologies Scientific Research Institute, Shota Rustaveli State University

SUMMARY

Membrane filtration is used for expulsion of microorganisms, their spores and waste products from thermolabile substances solutions. We have performed filtration of alcoholic and water solutions extracts of quince leaves, chamomile flowers, eucalyptus and hips fruits, St. John's wort, mint and bilberry fruits, blackberry leaves through the laboratorial microfiltration module designed by us. In all cases we have achieved complete restoration of membrane permeability with the various regenerants, what makes precondition for designing of microfiltration plants from the membranes produced by us and their introduction in pharmaceutical industry for filtration of extracts and pharmaceutical preparations containing bioactive compounds.

УЛУЧШЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ФИЛЬТРАЦИИ РАСТИТЕЛЬНЫХ ЭКСТРАКТОВ ПУТЕМ УСТАНОВЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ БАРОМЕМБРАН

Р.С.Гоциридзе, Н.П.Мхеидзе, Н.А.Мегрелидзе, С.Н.Мхеидзе, И.Н.Чхартишвили
Научно-исследовательский Институт Аграрной и Мембранной технологий Батумского Государственного Университета им. Шота Руставели

РЕЗЮМЕ

С целью удаления из растворов термолабильных веществ – микроорганизмов, их спор и продуктов жизнедеятельности, обращаются к фильтрации с использованием мембран. На изготовленном нами микрофильтрационном модуле проведена фильтрация спиртовых и водных экстрактов листьев айвы, зверобоя, мяты, ежевики, эвкалипта, цветков ромашки, плодов шиповника и черники. Во всех случаях полностью восстановлена производительность мембран разными химическими реактивами, что является условием того, что из изготовленных нами мембран можно создать микрофильтрационные установки и внедрить их в фармацевтические производства для фильтрации фармпрепаратов, содержащих биоактивные вещества.

სამკურნალო-კოსმეტიკური ჰიგიენური ლოსიონი

ხათუნა ნოზაძე, ლიანა ებანოძე, დავით ჯინჭარაძე, ნანა ბოკუჩავა
საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

მიღებულია ნატურალური სამკურნალო-კოსმეტიკური ჰიგიენური ლოსიონი პიონისა და იასამანის მცენარეულ სპირტიან და წყლიან ექსტრაქტებზე, რომელიც ატენიანებს, ატონიზირებს და კვებავს ნებისმიერი ტიპის სახის კანს.

XXI საუკუნე მსოფლიოს ყველა ქვეყანაში გამოიჩევა სამკურნალო-კოსმეტიკური პრეპარატების ფართო გამოყენებით.

თანამედროვე კოსმეტიკური კომპოზიციების კვლევის ობიექტია მრავალკომპონენტური ჰეტეროგენული სისტემები - ემულსიები, სუსპენზიები, ქაფები, გელი. მათი მიღება და გამოყენება განისაზღვრება ფაზათა გამყოფ საზღვარზე კოლოიდურ-ქიმიური პროცესებით, მდგრადობითა და სტაბილურობით, სტრუქტურულ-მექანიკური თვისებებით.

მსოფლიოს საინფორმაციო წყაროებში ყოველწლიურად იზრდება ბუნებრივ ნედლეულზე დამზადებული კოსმეტიკური ნაწარმის შესახებ ინფორმაცია.

კოსმეტიკური საშუალებების ტექნოლოგიის აქტუალური მიმართულებაა მათ შედგენილობაში მრავალფუნქციური ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების შეყვანა. ამ მიზნით, თანამედროვე კვლევის დარგში საჭიროა მკვეთრი წარმოდგენა გვექნდეს მათ სტრუქტურაზე, ამ სისტემების კლასიფიკაციაზე და კოლოიდურ-ქიმიურ თვისებებზე.

სამკურნალო კოსმეტიკოლოგიაში ყველაზე გავრცელებული პრეპარატებია სამკურნალო ხსნარები (სველი საფენები, ტენიანი გასაშრობი სახვევები, ლოსიონები, კომპრესები, სუსპენზიები, ზეთები და ზეთიანი ხსნარები) [1].

კოსმეტიკური კომპოზიციების საუკეთესო მაგალითია თხევადი ჰიგიენური ბუნებრივი სამკურნალო-კოსმეტიკური პრეპარატები - დისპერსიული სისტემები (ლოსიონები, ტყუალეტის წყლები, დეზოდორანტები), რომელშიც მყარი ან თხევადი ნივთიერებები გახსნილი ან განაწილებულია თხევად სადისპერსიო არეში.

პრეპარატების დამზადება წარმოებს ეკოლოგიურად სუფთა ტექნოლოგიით, არ საჭიროებს დიდ მატერიალურ დანახარჯს. თხევადი სამკურნალო პრეპარატები მზადდება წარმოების მიერ, ან სანიტარიულ-ჰიგიენური პირობების გათვალისწინებით აფთიაქებში, ან საშინაო პირობებში. მათი დამზადებისას სპეციალისტები ხშირად მიმართავენ ძველებურ რეცეპტებს. უკანასკნელ წლებში შეიმჩნევა უკონსერვანტო ნატურალური კოსმეტიკური საშუალებების დამზადება.

კოსმეტიკური პრეპარატები კლასიფიცირდება დანიშნულების, დისპერსიული ფაზისა და სადისპერსიო არის ხასიათის მიხედვით.

დანიშნულების მიხედვით თხევადი კოსმეტიკური პრეპარატები იყოფა: ჰიგიენურ, სპეციალურ და სამკურნალო-კოსმეტიკურ პრეპარატებად [1].

თხევადი კოსმეტიკური პრეპარატების დასამზადებლად გამხსნელის სახით გამოიყენება გამოხდილი წყალი, გლიცერინი, ძმარი, ღვინო, რძე, მცენარეული წვენი და სხვა. თუ ნიმუშში შედის რამდენიმე ნივთიერება და სხვადასხვა გამხსნელი, ნივთიერებას ხსნიან შესაბამის გამხსნელში მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების გათვალისწინებით.

ხსნადობის პროცესის დასაჩქარებლად გამოიყენება შესაბამისი ტექნოლოგიური ხერხები (დაფქვა, გაცხელება, შერევა და სხვა). თუ ნივთიერება ძნელად იხსნება დაბალი კონცენტრაციის სპირტში, მაშინ მას ხსნიან კონცენტრირებულ სპირტში (განზავებამდე), ხოლო ეთანოლურ ხსნარს ამატებენ გამოხდილი წყლის გაანგარიშებულ მოცულობას. აუცილებლობის შემთხვევაში მიღებულ ხსნარებს ფილტრავენ 2-3 ფენა დოლბანდში ან ბამბაში.

სამუშაო ითვალისწინებს სახის კანის, ყელის, ხელის გამწმენდი ჰიგიენური პრეპარატების - ლოსიონების მიღებას მცენარეული ნედლეულის, ნაყენებისა და ექსტრაქტების გამოყენებით.

ლოსიონი წარმოადგენს ორგანული და არაორგანული წარმოშობის სხვადასხვა ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების წყალ-ეთანოლიან ხსნარებს. ლოსიონები, როგორც წესი შეიცავს 15-20% ეთანოლს, რადგან უფრო მაღალი კონცენტრაციის ეთანოლი ახდენს კანზე გამაღიზიანებელ

მოქმედებას. ლოსიონები გამოიყენება კანის ცხიმის, ოფლის, მტვრისაგან გასაწმენდად, გასაგრძობლად და დასარბილებლად; ხელის კანის გასაწმენდად, ფეხების მოსავლელად. განსხვავებული შედგენილობის წყალობით, ის არბილებს, კვებავს, ატონიზირებს კანს, აცილებს ჭარბ ცხიმინობას, ანიჭებს კანს მკრთალ სახეს, აფერხებს კანის დანაოჭებას. ლოსიონები არ ცვლის დაბანას, მისი დანიშნულებაა კანის გამოცოცხლება.

ლოსიონების pH მნიშვნელობა 2.5-9.0 ფარგლებშია, ხელის გამწმენდი ლოსიონების pH დაბალია. სახის კანის მოვლის ლოსიონების pH 5.0 – 7.0 ფარგლებშია. ლოსიონების შენახვის ვადაა 12 თვე, ტემპერატურის ცვლილებისას -10°C – 45°C.

ლოსიონში ეთანოლის შემცველობა განისაზღვრება კანის ტიპის მიხედვით:

- მშრალი კანის ლოსიონები შეიცავს 10-15% ეთანოლს;
- ნორმალური კანის ლოსიონები - 18-20%;
- ცხიმიანი კანის ლოსიონები - არაუმეტეს 30% (იშვიათად 35%-მდე).

მშრალი ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებები (სურნელოვანი ნივთიერებები, რომელიც გამოიყენება ლოსიონების არომატიზაციისათვის) ცუდად იხსნება მცირე სპირტის შემცველ წყალ-სპირტიან ხსნარებში. ხსნადობის გაზრდის მიზნით მასში შეყავთ ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები - სოლუბილიზატორები.

მშრალი კანის მოვლის ეთანოლური ხსნარების ხშირმა გამოყენებამ, ასევე ეთანოლის უმნიშვნელო რაოდენობით შემცველობამ შეიძლება გამოიწვიოს კანის გამოშრობა და გაღიზიანება. ამიტომ, მუდმივად ეთანოლური ლოსიონების გამოყენება მშრალი კანის მოსავლელად, დაბანის ნაცვლად, დაუშვებელია.

ლოსიონების დასამზადებლად მცენარეების შერჩევა ხდება კანის ტიპის გათვალისწინებით.

ჩვენს მიერ შერჩეულია პიონისა და იასამანის მცენარეების ყვავილებისა და ფოთლებისაგან მიღებული წყლიანი და სპირტიანი გამონაწურები [2-3].

პიონი - იორდასალამის ყვავილები, ფოთლები და ფესვები შეიცავს შაქარს, ტანინებს, სახამებელს, ალკალოიდებს, ეთერზეთებს. ნაყენს ახასიათებს დამამშვიდებელი მოქმედება. გამოიყენება უძილობის, სისხლძარღვთა სხვადასხვა დარღვევების შემთხვევაში. აუმჯობესებს ძილს, ხსნის თავის ტკივილებს, ამალღებს შრომისუნარიანობას.

იასამანი - ერთ-ერთი უძველესი დეკორატიული კულტურაა. ჯერ კიდევ IV საუკუნეში ცნობილი იყო სპარსეთში. XI-XII საუკუნეებში გავრცელდა ჩინეთში, სადაც აქტიურად იყენებდნენ, როგორც სამკურნალო საშუალებას. შემდეგ მოიწონეს ევროპელებმა და თურქეთიდან შემოიტანეს XVI საუკუნეში.

სამკურნალო თვისებების გამო იასამანს იყენებენ მრავალ პრეპარატში. გამოიყენება ყვავილები, ფოთლები, ფესვები და ქერქი.

იასამანში შედის ეთერზეთები და ფლავონოიდები, რომელიც დადებითად მოქმედებს ადამიანის ორგანიზმზე. შეიცავს დიდი რაოდენობით ასკორბინმჟავას.

იასამანის ფოთლების ნახარში გამოიყენება კოსმეტიკაში - თმის ძირების გასამაგრებლად, ხოლო მალამო მომენტალურად არჩენს ყოველგვარ ჭრილობასა და დაბეჭილობას.

ჩვენს მიერ მიღებული ჰიგიენური გამწმენდი, მატონიზირებელი, დამატენიანებელი ლოსიონი შემდეგი შედგენილობისაა:

- პიონის ფოთლები და ყვავილები, გ - 40
- იასამანის ყვავილები და ფოთლები, გ - 50
- გამოხდილი წყალი, მლ - 400
- ეთანოლი 70%, მლ - 290
- თაფლი, გ - 10-12 (ჩაის კოვზი)

ლოსიონის მომზადების ტექნოლოგია შემდეგია:

40გ წინასწარ გამშრალ, დაქუცმაცებულ პიონის ყვავილებსა და ფოთლებს ათავსებენ ემალირებულ ჭურჭელში, ამატებენ 400მლ (თანაფარდობით 1:10) ადუღებულ წყალს, ახურავენ ხუფს, ფუთავენ, აყოვნებენ 4-6 სთ, ან წყლის აბაზანაზე 10-15 წთ. გაცივების შემდეგ ფილტრავენ ბამბის ფენაში.

ცალკე ამზადებენ იასამანის სპირტიან ნაყენს: 50გ მშრალ დაქუცმაცებულ იასამანის ყვავილებსა და ფოთლებს ათავსებენ მუქ ქილაში, ამატებენ 290 მლ 70% ეთანოლს (თანაფარდობით 1:5). მჭიდროდ ახურავენ ხუფს და აყოვნებენ გრილ ადგილას 10-14 დღე მუდმივი მორევით. მიღებულ სპირტიან ნაყენს ფილტრავენ ბამბის ფენაში. გადააქვთ სუფთა მუქ ბოთლში.

ლოსიონის დასამზადებლად:

მშრალი კანის შემთხვევაში - 200 მლ პიონის ნაყენს ამატებენ 1 ჩაის კოვზ თაფლს და 20 მლ იასამანის სპირტიან ნაყენს.

ნორმალური კანის შემთხვევაში - 200 მლ პიონის ნაყენს ამატებენ 1 ჩაის კოვზ თაფლს და 35 მლ იასამანის სპირტიან ნაყენს.

ცხიმიანი კანის შემთხვევაში - 200 მლ პიონის ნაყენს ამატებენ 1 ჩაის კოვზ თაფლს და 45 მლ იასამანის სპირტიან ნაყენს.

ჭარბი ცხიმიანი კანის შემთხვევაში - 200 მლ პიონის ნაყენს ამატებენ 1 ჩაის კოვზ თაფლს და 55 მლ იასამანის სპირტიან ნაყენს.

მიღებულ ლოსიონს ამატებენ რამდენიმე წვეთ სურნელს ან სუნამოს. საღამოს სახეს ასუფთავებენ ნაზი, წრიული მოძრაობით ლოსიონში დასველებული ზამბის ტამპონით, აყოვნებენ გამრობამდე. შემდეგ ისვამენ სახის კანის ტიპის გათვალისწინებით მკვებავ კრემს.

ჩვენს მიერ მიღებული ნატურალური კოსმეტიკური ლოსიონი საუკეთესოდ ასუფთავებს, ატენიანებს და ატონიზირებს კანს.

ლიტერატურა – ЛИТЕРАТУРА – REFERENCES

1. И.И. Краснюк, Г.В. Михайлова, Е.Т. Чиждова. Лечебно-косметические средства. Москва, Асадема, 2006, с. 111-159;
2. Лечебные растения. Кострома. 2002, с. 224;
3. http://www.shin.ge/index.php?option=com_content&view=article&id=476:rogor-movuarot-iasamnis-buchks-da-misi-saotsari-samkurnalo-tvisebebi&catid=50&Itemid=194

MEDICINAL-COSMETIC HYGIENIC LOTION

Khatuna Nozadze, Liana Enaboidze, David Jincharadze, Nana Bokuchava
Georgian Technical University

SUMMARY

Water and alcohol based herbal extracts of Peony and Lilac was used to create natural medicinal-cosmetic hygienic lotion with moisturizing and nourishing properties for any type of facial skin.

ЛЕЧЕБНО-КОСМЕТИЧЕСКИЙ ГИГИЕНИЧЕСКИЙ ЛОСЬОН

Х.Нозадзе, Л.Эбаноидзе, Д.Джинчарадзе, Н.Бокучава
Грузинский Технический Университет

РЕЗЮМЕ

На основе водных и спиртовых экстрактов пиона и сирени получен натуральный лечебно-косметический гигиенический лосьон для любого типа кожи лица, обладающий увлажняющим, тонизирующим и питательным свойствами.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАНИЙ ЗАДНЕЙ СТЕНКИ ПАРОГАЗОВОГО КАНАЛА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКЕ

М.Г.Хуციшвили

Грузинский технический университет

Исследованы колебания задней стенки парогазового канала на основе решения задачи пар-жидкость-твёрдый металл с учетом взаимного влияния теплообмена, фазового перехода и гидродинамики волнового движения. С помощью уравнений можно провести в линейном приближении анализ частоты колебаний границы раздела фаз пар-жидкий металл для различных металлов в зависимости от скорости сварки и мощности луча.

Одним из распространенных дефектов шва при сварке лучом лазера является нестабильность глубины сварного шва по его длине при кинжальном проплавлении, выражающаяся в появлении зубцов или пиков проплавления [1,2].

Для исследования формирования шва и определения гидродинамических процессов в канале проплавления проводили моделирование и фиксировали результаты опытов скоростной съемкой (до 3000 кадров в секунду). Эксперименты проводили на образцах из ситалла и комбинированных образцах (металл со ситаллом).

Причинами колебаний глубины проплавления являются большой угол наклона нижней части канала и натекания металла (рис. 1)

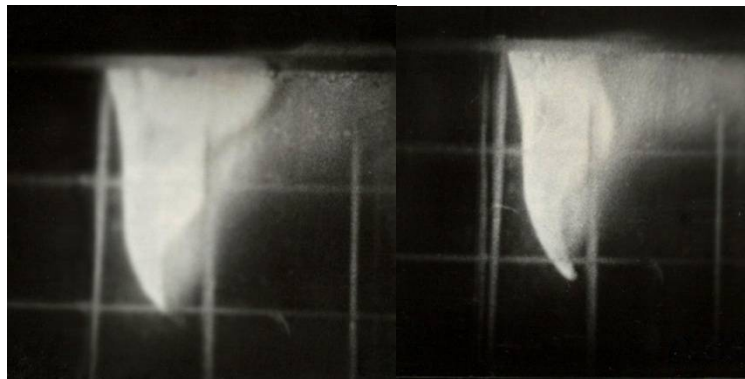


Рис. 1. Характерные кадры из кинограмм колебательного процесса задней стенки парогазового канала: $P = 3,5w$; $f = 144,5 \cdot 10^{-3} m$; $V_{св} = 5,6 \cdot 10^{-3} m/c$; $t = 0, 0182 c$.

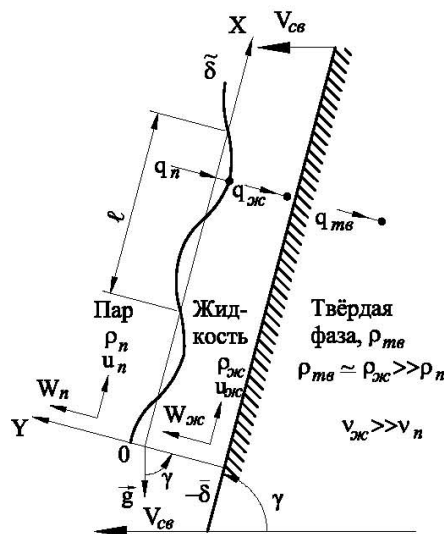


Рис. 2. Схема процесса.

В опубликованных теоретических работах анализ неустойчивости стенок парогазового канала проводится с использованием известных решений задачи о неустойчивости Кельвина-Гельмгольца при постоянной толщине слоя жидкого металла [1-5]. В качестве первого приближения для течения металла вдоль фронта плавления на задней стенке парогазового канала с глубоким проплавлением рассматривается плоское течение пленки расплавленного металла под действием силы тяжести и импульса электронов. Кроме того, определяется стационарное распределение функции тока и температуры, соответствующее такому течению, и исследуется гидродинамическая неустойчивость этого стационарного течения относительно бесконечно малых двумерных возмущений. К сожалению, результаты данных исследований не имеют практической ценности, так как в граничных условиях задачи совершенно неоправданно пренебрегают влиянием поверхностного натяжения, не учитываются процессы конденсации на границе раздела фаз, форма записи кинематических условий на границе раздела фаз нетрадиционна и формально противоречива, а главное – отсутствует частотный анализ гидродинамической неустойчивости пленки жидкого металла.

В работах [2,3] исследуется неустойчивость горизонтального слоя жидкого металла, нагреваемого со стороны свободной поверхности горизонтальным лучом лазера и показано, что при критической плотности теплового потока и малом влиянии гравитации жидкий слой неустойчив в связи с образованием капиллярно-гравитационных волн..

Таким образом, проведенный обзор опубликованных теоретических работ по исследованию неустойчивости стенок парогазового канала показывает, что математический анализ колебаний задней стенки парогазового канала с частотным анализом гидродинамической неустойчивости не проводился.

В соответствии с вышеизложенным была поставлена задача: исследовать колебания задней стенки парогазового канала на основе решения сопряженной задачи пар-жидкость-твердый металл с учетом взаимного влияния теплообмена, фазового перехода и гидродинамики волнового движения.

Математическая модель процесса основана на следующих допущениях: рассматривается конденсация на слое и движение слоя жидкого металла, ограниченного с одной стороны пароплазменным потоком, а с другой – плоской полубесконечной поверхностью твердого металла, имеющей угол наклона γ к горизонту и движущейся со скоростью сварки $\bar{V}_{св}$. Предполагается, что осредненное движение паровой и жидкой фаз и процесс теплообмена описывается одномерной моделью, позволяющей определить средние по времени значения толщины слоя жидкого металла ($\bar{\delta}$) и скорости прихода сконденсировавшейся массы жидкого металла на границу раздела фаз.

Схема процесса представлена на рис. 2, где индексами $W_{п}, U_{п}, q_{п}, \rho_{п}$, обозначены соответственно поперечная и продольная компоненты скорости, плотность потока тепловой энергии и плотность пароплазменного потока, а индексами $W_{ж}, U_{ж}, q_{ж}, \rho_{ж}$ – аналогичные переменные для жидкой фазы и $q_{тв}, \rho_{тв}$ – для твердой фазы. Буквами l, A обозначены длина и амплитуда волны, δ – толщина слоя жидкого металла, \vec{g} – вектор ускорения свободного падения. Плоскость $хоу$ является плоскостью симметрии парогазового канала.

Рассматривается участок поверхности раздела фаз, в пределах которого вдоль оси x можно пренебречь изменением толщины слоя жидкого металла. Скорость конденсации $\bar{V}_{к}$ считается постоянной. В этом случае осредненное движение фаз в рамках одномерной модели является потенциальным с тангенциальными разрывами на границе раздела фаз и на стенке.

На осредненное стационарное движение фаз накладывается периодическое длинноволновое возмущение в виде импульса давления $\nabla \bar{p}$, определяемого согласно физической модели взрывообразным характером и испарения металла со дна канала. Амплитуда колебаний границы раздела фаз по данным скоростной киносъемки может быть принята меньше длины волны. Каждая физическая переменная, изменяющаяся во времени, представлена в виде алгебраической суммы осредненной ($\overline{\dots}$) и пульсационной ($\tilde{\dots}$) составляющих, при этом осредненная составляющая считается квазипостоянной. Жидкая фаза несжимаема. В первом приближении пренебрегается

изменением плотности пара вдоль границы раздела фаз. Отношение плотности удовлетворяет условию $\rho_{\text{п}} / \rho_{\text{ж}} \ll 1$.

С учетом принятых допущений уравнение теплопереноса и движения как для жидкости, так и для пара имеют вид [6]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V}\nabla)T = a\nabla^2 T. \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V}\nabla)\vec{V} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \vec{g} + \nu\nabla^2 \vec{V}. \quad (2)$$

$$\nabla \vec{V} = 0. \quad (3)$$

где \vec{V} – вектор скорости, T – температура, t – время, \vec{p} – вектор давления, \vec{g} – вектор ускорения свободного падения, ρ – плотность, ν – кинематическая вязкость, a – коэффициент теплопроводности.

В соответствии с физической моделью и принятыми допущениями расчетная схема процесса имеет вид, представленный на рис. 2. Вектор скорости \vec{V} имеет продольную и поперечную компоненты. Система координат выбрана таким образом, чтобы ось x была направлена вдоль, а ось y – перпендикулярно невозмущенной границе раздела фаз в направлении скорости осредненного движения жидкости и пара.

Процесс теплопроводности в твердой фазе описывается уравнением:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_{\text{ТВ}} \nabla^2 T. \quad (4)$$

Искомое решение системы уравнений (1) ÷ (4) должно удовлетворять следующим граничным условиям [6 ÷ 8], так как в соответствии со схемой, представленной на рис. 2, распространение пара с передней стенки имеет горизонтальное направление

$$\text{при } y \rightarrow \infty, \quad \widetilde{U}_{\text{п}} = 0 \quad (5)$$

$$\text{при } y = \pm \delta, \quad \widetilde{W}_{\text{п}} = \frac{\partial \delta}{\partial t}; \quad (6)$$

$$\widetilde{W}_{\text{ж}} = \frac{\partial \delta}{\partial t} + \bar{U}_{\text{ж}} \frac{\partial \delta}{\partial x} + \bar{V}_{\text{к}} + \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma; \quad (7)$$

$$\bar{U}_{\text{ж}} = \bar{U}_{\text{п}} \left(\frac{\rho_{\text{п}}}{\rho_{\text{ж}}} \right) S; \quad (8)$$

$$p_{\text{п}} - p_{\text{ж}} = \sigma_{\text{ж}} \left(\frac{\partial^2 \delta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta}{\partial y^2} \right); \quad (9)$$

$$q_{\text{п}} = q_{\text{ж}} + \rho_{\text{п}} \Gamma_{\text{к}} \bar{V}_{\text{к}}; \quad (10)$$

$$T = T_{\text{к}}; \quad (11)$$

$$\text{при } y = -\delta \quad \bar{U}_{\text{ж}} = 0 \quad \bar{W}_{\text{ж}} = \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma = V_{\text{пл}}; \quad (12)$$

$$q_{\text{ж}} = q_{\text{ТВ}} + \rho_{\text{ж}} \Gamma_{\text{пл}} \bar{V}_{\text{пл}}; \quad (13)$$

$$T = T_{\text{пл}}; \quad (14)$$

$$\text{при } y \rightarrow -\infty \quad q_{\text{т}} B = -\lambda_{\text{т}} B \frac{\partial T}{\partial y}; \quad (15)$$

$$T = T_0, \quad (16)$$

где Γ_k, T_k, V_k и $\Gamma_{пл}, T_{пл}, V_{пл}$ – соответственно удельная теплота, температура, скорость фазового перехода при конденсации и плавлении; $\sigma_{ж}, S$ – коэффициенты поверхностного натяжения жидкости и скольжения фаз; $\lambda_{тв}$ – коэффициент теплопроводности твердой фазы, T_0 – температура термостатирования. В граничных условиях (6) - (9) члены второго порядка малости опущены для простоты анализа.

В соответствии с физической моделью задачу целесообразно исследовать с помощью метода малых возмущений [5]. Сущность этого метода вкратце сводится к следующему. На основное течение, неустойчивость которого предполагается исследовать, накладывается переменное по времени возмущающее движение. Решение задачи сводится к отысканию зависимости возмущающего движения от времени, которая и определяет неустойчивость течения. Если параметры возмущающего движения нарастают во времени, то исследуемое движение неустойчиво и в таком виде существовать не может.

С учетом принятых допущений, результирующее движение процесса колебаний задней стенки парогазового канала будет иметь следующие параметры:

Для пара

$$\begin{aligned} W_{п} &= \bar{W}_{п} + \tilde{W}_{п}; & U_{п} &= \bar{U}_{п} + \tilde{U}_{п}; \\ P_{п} &= \bar{P}_{п} + \tilde{P}_{п}; & T_{п} &= \bar{T} + \tilde{T}; \end{aligned} \quad (17)$$

для жидкости

$$\begin{aligned} P_{ж} &= \bar{P}_{ж} + \tilde{P}_{ж}; & T_{ж} &= \bar{T} + \tilde{T}; \\ W_{ж} &= \bar{W}_{ж} + \tilde{W}_{ж}; & U_{ж} &= \bar{U}_{ж} + \tilde{U}_{ж}; \end{aligned} \quad (18)$$

для твердой фазы

$$\begin{aligned} W_{тв} &= \bar{W}_{тв} = V_{св} \cos \gamma; \\ U_{тв} &= \bar{U}_{тв} = -V_{св} \sin \gamma; \\ P_{тв} &= \bar{P}_{тв}; & T_{тв} &= \bar{T} + \tilde{T}; \end{aligned} \quad (19)$$

Для дальнейшего упрощения задачи предположим, что составляющие скорости основного движения $\bar{U}_{п}, \bar{U}_{ж}$ зависят только от координаты y , а две остальные составляющие равны нулю, т.е. $\bar{W}_{п} = \bar{W}_{ж} = 0$. Давления $P_{п}$ и $P_{ж}$ зависят от обеих координат x и y , однако, для осредненных составляющих можно считать, что $\bar{P}_{п} \cong \bar{P}_{ж}$; $P_{тв} = \bar{P}_{тв} = 0$. Подстановка параметров (17)-(19) в уравнения теплопереноса и движения (1)-(4) приводит к следующим системам нелинейных дифференциальных уравнений:

для пара

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \bar{U}_{п} \frac{\partial T}{\partial x} = a_n \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right), \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{U}_{п}}{\partial t} + \bar{U}_{п} \frac{\partial \tilde{U}_{п}}{\partial x} + \bar{W}_{п} \frac{\partial \bar{U}_{п}}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho_{п}} \frac{\partial \tilde{P}_{п}}{\partial x} + \\ &+ g \cos \gamma + \nu \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_{п}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{U}_{п}}{\partial y^2} \right); \end{aligned} \quad (21)$$

$$\frac{\partial \tilde{W}_{п}}{\partial t} + \bar{U}_{п} \frac{\partial \tilde{W}_{п}}{\partial x} = -\frac{1}{\rho_{п}} \frac{\partial \tilde{P}_{п}}{\partial y} + g \sin \gamma + \nu \left(\frac{\partial^2 \tilde{W}_{п}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{W}_{п}}{\partial y^2} \right) \quad (22)$$

$$\frac{\partial \tilde{U}_{п}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{W}_{п}}{\partial y} = 0. \quad (23)$$

для жидкости

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial T}{\partial x} = a_j \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right), \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x} + \bar{W}_j \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial y} = & -\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial \tilde{P}_j}{\partial x} + \\ & + g \cos \gamma + \nu \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{U}_j}{\partial y^2} \right); \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{W}_j}{\partial t} + \bar{U}_n \frac{\partial \tilde{W}_j}{\partial x} = & -\frac{1}{\rho_n} \frac{\partial \tilde{P}_j}{\partial y} + g \sin \gamma + \\ & + \nu \left(\frac{\partial^2 \tilde{W}_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{W}_j}{\partial y^2} \right); \end{aligned} \quad (26)$$

$$\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{W}_j}{\partial y} = 0; \quad (27)$$

для твердой фазы

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_{ТВ} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right); \quad (28)$$

где параметры возмущающего движения считаются небольшими по сравнению с параметрами основного потока, что позволяет пренебречь в уравнениях членами второго порядка малости.

Известно, что в общем случае возмущающее движение посредством разложения в ряд Фурье можно представить в виде суммы отдельных возмущений [5]. Зададим возмущающее движение колебаниями, распространяющимися в виде волны вдоль оси x . На основе физической модели колебания границы раздела фаз между жидкостью и паром имеют периодический характер. Если примем, что они происходят по гармоническому закону, тогда

$$\tilde{\delta} = A_\delta \exp[-i(\omega t - kx)], \quad (29)$$

где A_δ и ω – амплитуда и круговая частота колебаний, k – волновое число вдоль оси x (рис. 2).

$$k = \frac{2\pi}{i} \quad (30)$$

Анализировать произвольное возмущение физической величины δ при помощи стандартной процедуры разложения по нормальным модам в ряд Фурье нет необходимости. Так как для неустойчивости движения нужна неустойчивость хотя бы одной из мод, достаточно исследовать единственную моду общего вида [5]. Уравнение волны (29) можно записать с помощью тригонометрических функций, которые в соответствии с формулой Эйлера могут быть выражены через показательные функции с мнимым показателем степени. Вещественная часть этого мнимого числа используется для характеристики колебаний.

Вводим вспомогательные скалярные функции – потенциалы скоростей для паровой и жидкой фазы (φ_n, γ_j), определяемые выражениями:

для пара:

$$\tilde{U}_n = \frac{\partial \varphi_n}{\partial x}; \quad \tilde{W}_n = \frac{\partial \varphi_n}{\partial y} \quad (31)$$

для жидкого металла

$$\tilde{U}_j = \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}; \quad \tilde{W}_j = \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}; \quad (32)$$

С учетом принятых допущений будем искать решение задачи (1)÷(16) в виде скалярных функций φ_n , $\varphi_{ж}$, T , эквивалентных по виду зависимости (29). Для φ_n из граничных условий (5) и (6) имеем:

$$\tilde{U} \Big|_{y \rightarrow \infty} = \frac{\partial \varphi_n}{\partial x} = 0; \tag{33}$$

$$\tilde{W} \Big|_{y=\pm\delta} = \frac{\partial \delta}{\partial t} = \frac{\partial \varphi_n}{\partial y}; \tag{34}$$

Из анализа условий (33)÷(34) следует, что решение линеаризованной системы уравнений (21)-(23) необходимо искать в форме:

$$\varphi_n = A_n f(y) \exp[-i(\omega t - kx)], \tag{35}$$

где A_n – амплитуда, $f(y)$ – функция, зависящая от y , так как основное движение зависит только от этой координаты.

Проведем подстановку выражений (31) в уравнения (21) - (23), в результате получим:

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x \partial t} + \bar{U}_n \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2} + \frac{\partial \varphi_n}{\partial y} \frac{\partial \bar{U}_n}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_n} \frac{\partial \tilde{P}_n}{\partial x} + g \cos \gamma + \nu_n \left(\frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x \partial y^2} \right); \tag{36}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x \partial t} + \bar{U}_n \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x \partial y} = -\frac{1}{\rho_n} \frac{\partial \tilde{P}_n}{\partial y} + g \sin \gamma + \nu_n \left(\frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial y^3} \right); \tag{37}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial y^2} = 0. \tag{38}$$

Подставляя написанное ранее выражение (35) в уравнение (38), получаем:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - k^2 f = 0. \tag{39}$$

Это уравнение имеет решения $\exp(ky)$ и $\exp(-ky)$. Из них надо выбрать второе, поскольку для первого не выполняются граничные условия (33) и (34). Таким образом, система линеаризованных уравнений (21)-(23) должна удовлетворять решению [7].

$$\varphi_n = A_n \exp[-ky - i(\omega t - kx)] \tag{40}$$

Проведем дифференцирование уравнения (36) по переменной y , а уравнения (37) – по переменной x . Получим:

$$\frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x \partial y \partial t} + \frac{\partial^2 \varphi_n \partial \bar{U}_n}{\partial x^2 \partial y} + \bar{U}_n \frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial^2 \varphi_n \partial \bar{U}_n}{\partial y^2 \partial y} + \frac{\partial \varphi_n}{\partial y} \frac{\partial^2 \bar{U}_n}{\partial y^2} = -\frac{1}{\rho_n} \frac{\partial^2 \tilde{P}_n}{\partial x \partial y} + \nu_n \left(\frac{\partial^4 \varphi_n}{\partial x \partial y^3} \right); \tag{41}$$

$$\frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x \partial y \partial t} + \bar{U}_n \frac{\partial^3 \varphi_n}{\partial x^3 \partial y} = -\frac{1}{\rho_n} \frac{\partial^2 \tilde{P}_n}{\partial x \partial y} + \nu_n \left(\frac{\partial^4 \varphi_n}{\partial x^3 \partial y} + \frac{\partial^4 \varphi_n}{\partial x \partial y^3} \right). \tag{42}$$

Следует отметить, что при дифференцировании члены уравнений $g \cos \gamma$ и $g \sin \gamma$ принимались константами.

Исключая функцию давления $\tilde{P}_n(x,y)$ из системы вычитаем уравнение (42) из уравнения (41), в результате имеем:

$$\frac{\partial \varphi_{\Pi}}{\partial x^2} \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} + \frac{\partial^2 \varphi_{\Pi}}{\partial y^2} \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_{\Pi}}{\partial y} \frac{\partial^2 \bar{U}_{\Pi}}{\partial y^2} = 0. \quad (43)$$

Проведем подстановку решения (40) в уравнение (43):

$$A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)] \left\{ i^2 k^2 \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} + k^2 \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} - k \frac{\partial^2 \bar{U}_{\Pi}}{\partial y^2} \right\} = 0, \quad (44)$$

где $i^2 = -1$. В уравнении (44) одинаковые члены в фигурных скобках с разными знаками сокращаются. Поскольку выражение за фигурными скобками в (44) нулю равно быть не может, то следствием из этого уравнения является:

$$\frac{\partial^2 \bar{U}_{\Pi}}{\partial y^2} = 0, \quad (45)$$

которое имеет решение общего вида

$$\bar{U}_{\Pi} = A_1 y + B_1; \quad (46)$$

где A_1 и B_1 -константы, определяемые из границе раздела фаз, а именно:

$$A_1 = \left. \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} \right|_{y=\pm\tilde{\delta}}, \quad (47)$$

$$B_1 = \left\{ \left. \frac{\partial \bar{U}_{\Pi}}{\partial y} \right|_{y=\pm\tilde{\delta}} - \tilde{\delta} \left. \frac{\partial U_{\Pi}}{\partial y} \right|_{y=\pm\tilde{\delta}} \right\}. \quad (48)$$

Сделаем подстановку решений (40) и (46) в уравнения (36) и (37) и одновременно перенесем производные функции в левую часть уравнений (36), (37):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{P}_{\Pi}}{\partial x} &= \rho_{\Pi} g \cos \gamma - \rho_{\Pi} \omega k A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)] + \\ &\rho_{\Pi} (A_1 y + B_1) k^2 A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)] + \\ &+ \rho_{\Pi} A_1 k A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)]; \end{aligned} \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{P}_{\Pi}}{\partial y} &= \rho_{\Pi} g \sin \gamma - i \rho_{\Pi} \omega k A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)] + \\ &+ \rho_{\Pi} (A_1 y + B_1) k^2 A_{\Pi} \exp[-ky - i(\omega t - kx)]. \end{aligned} \quad (50)$$

Эта система уравнений имеет решение общего вида:

$$\tilde{P}_{\Pi} = \rho_{\Pi} g (y \sin \gamma + x \cos \gamma) + i \rho_{\Pi} A_{\Pi} \{ \omega - a - k(A_1 y + B_1) \} \exp[-ky - i(\omega t - kx)] + C_1; \quad (51)$$

Где A_1 и B_1 - константы, определяемые выражениями (47) и (48), C_1 – произвольная константа неявного вида.

Таким образом, получен первый ряд решений поставленной ранее задачи для пара.

Для $\varphi_{\text{ж}}$ из граничных условий (7), (12) имеем:

$$\tilde{W}_{\text{ж}} \Big|_{y=\tilde{\delta}} = \frac{\partial \tilde{\delta}}{\partial t} + \bar{U}_{\text{ж}} \frac{\partial \tilde{\delta}}{\partial x} + \bar{V}_{\text{к}} + \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma = \frac{\partial \varphi_{\text{ж}}}{\partial y}; \quad (52)$$

$$\tilde{W}_{\text{ж}} \Big|_{y=-\tilde{\delta}} = \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma = \bar{V}_{\text{шт}}; \quad (53)$$

$$\bar{U}_{\text{ж}} \Big|_{y=-\tilde{\delta}} = 0. \quad (54)$$

Очевидно, что условия (52)-(54) можно дополнить из физических соображений. В частности, на границе раздела фаз средняя скорость движения жидкого металла вдоль оси x равна фазовой скорости перемещения фронта волны возмущения, т.е.

$$\bar{U}_j \Big|_{y=\pm\delta} = \frac{\omega}{k}. \tag{55}$$

Условия прилипания потока жидкого металла на границе с твердым металлом должны выполняться как для осредненных, так и для пульсационных составляющих скорости, т.е. в дополнение к условиям (53), (54) имеем:

$$\tilde{W} \Big|_{y=-\delta} = \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} = 0. \tag{56}$$

Будем искать решение задачи φ_j относительно произвольного сечения потока $x = x_0$. Из анализа граничных условий (52), (55), (56) и зависимости (29) следует, что решение линеаризованной системы уравнений (25)-(27) можно представить в виде [7]:

$$\varphi_j = \delta \frac{\bar{V}_k + \bar{V}_{cb} \sin \gamma}{2\delta} \left[(x - x_0)^n - (y + \bar{\delta} + \tilde{\delta})^n \right] + A_j f(y) \exp[-i(\omega t - kx)], \tag{57}$$

где A_j -амплитуда, $f(y)$ -неизвестная функция от y , n – неизвестный показатель степени.

Проведем подстановку выражений (32) в уравнения (25)-(27), в результате получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x \partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial \tilde{P}_j}{\partial x} + \\ + g \cos \gamma + \nu_j \left(\frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial x \partial y^2} \right); \end{aligned} \tag{58}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y \partial t} + \bar{U} \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x \partial y} = -\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial P_j}{\partial y} + \\ + g \sin \gamma + \nu_j \left(\frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial y^3} \right); \end{aligned} \tag{59}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} = 0. \tag{60}$$

Подставляя выражение (57) в уравнение (60), получим:

$$n(n-1) \frac{\bar{V}_k + \bar{V}_{cb} \sin \gamma}{2\delta} \left[(x - x_0)^{n-2} - (y + \bar{\delta} + \tilde{\delta})^{n-2} \right] + \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - k^2 f \right\} = 0. \tag{61}$$

Это уравнение имеет решения $\exp[k(y + \bar{\delta})]$ и $\exp[-k(y + \bar{\delta})]$ при показателе степени $n = 2$. кроме того, граничные условия (52) и (56) будут удовлетворены, если решение выбирается в виде комбинации экспонент, т.е. имеет следующий вид:

$$\varphi_j \frac{\bar{V}_k + \bar{V}_{cb} \sin \gamma}{2\delta} \left[(x - x_0)^2 - (y + \bar{\delta} + \tilde{\delta})^2 \right] + A_j ch[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)]; \tag{62}$$

где гиперболический косинус равен:

$$ch[k(y + \bar{\delta})] = \frac{1}{2} \left\{ \exp[k(y + \bar{\delta})] + \exp[-k(y + \bar{\delta})] \right\}.$$

Проведем дифференцирование уравнения (58) по переменной y , а уравнения (59) по переменной x , в результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial x \partial y \partial t} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial y} + \bar{U}_j \frac{\partial^3 \varphi_j}{\partial x^3 \partial y} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial y} + \\ + \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial^2 \bar{U}_j}{\partial y^2} = -\frac{1}{\rho_j} \frac{\partial^2 \tilde{P}_j}{\partial x \partial y} + \nu_j \left(\frac{\partial^4 \varphi_j}{\partial x^3 \partial y} + \frac{\partial^4 \varphi_j}{\partial x \partial y^3} \right); \end{aligned} \tag{63}$$

$$\frac{\partial^3 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x \partial y \partial t} + \bar{U}_{\text{ж}} \frac{\partial^2 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x^2 \partial y} = -\frac{1}{\rho_{\text{ж}}} \frac{\partial P_{\text{ж}}}{\partial x \partial y} + u_{\text{ж}} \left(\frac{\partial^4 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x^3 \partial y} + \frac{\partial^4 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x \partial y^3} \right); \quad (64)$$

где члены уравнений $g \cos \gamma$ и $g \sin \gamma$ при дифференцировании принимались константами.

Исключая функцию давления $\tilde{P}_{\text{ж}}(x, y)$ из системы, вычитаем уравнение (64) из уравнения (63), имеем:

$$\frac{\partial^2 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x^2} \frac{\partial \bar{U}_{\text{ж}}}{\partial y} + \frac{\partial^2 \varphi_{\text{ж}}}{\partial y^2} \frac{\partial \bar{U}_{\text{ж}}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{\text{ж}}}{\partial y} \frac{\partial^2 \bar{U}_{\text{ж}}}{\partial y^2} = 0. \quad (65)$$

Поскольку из уравнения (60) следует:

$$\frac{\partial^2 \varphi_{\text{ж}}}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2},$$

то первые два члена в (65) можно сократить. Производная $\frac{\partial \varphi_{\text{ж}}}{\partial y^2}$, в общем случае нулю равна быть не может, поэтому (65) эквивалентно уравнению:

$$\frac{\partial^2 \bar{U}_{\text{ж}}}{\partial y^2} = 0. \quad (66)$$

которое имеет решение общего вида:

$$\bar{U}_{\text{ж}} = A_2 y + B_2, \quad (67)$$

где A_2 и B_2 – константы, определяемые из условий на границе раздела фаз (54), (55), (8):

$$A_2 = \frac{\omega}{k(\bar{\delta} + \tilde{\delta})} = S \left(\frac{\rho_{\text{п}}}{\rho_{\text{ж}}} \right) \frac{\partial U_{\text{п}}}{\partial y} \Big|_{y=\pm\tilde{\delta}}; \quad (68)$$

$$B_2 = \frac{\omega \bar{\delta}}{k(\bar{\delta} + \tilde{\delta})} = \bar{\delta} S \left(\frac{\rho_{\text{п}}}{\rho_{\text{ж}}} \right) \frac{\partial \bar{U}_{\text{п}}}{\partial y} \Big|_{y=\pm\tilde{\delta}}; \quad (69)$$

Здесь в первом приближении принимаем, что коэффициент скольжения фаз S не зависит от координаты y .

Сделаем подстановку (62) и (67) в уравнения (58) и (59), затем перенесем производные функции $\tilde{P}_{\text{ж}}$ в левую часть уравнений, а все остальные выражения – в правую часть уравнений (58), (59):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{P}_{\text{ж}}}{\partial x} = & \rho_{\text{ж}} g \cos \gamma - \rho_{\text{ж}} \frac{A_2 (\bar{V}_{\text{к}} + \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma)}{\bar{\delta}} (y + \bar{\delta} + \tilde{\delta}) - \\ & - \rho_{\text{ж}} i^2 k \omega A_{\text{ж}} \text{ch}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)] + \\ & + \rho_{\text{ж}} (A_{2y} + B_2) k^2 A_{\text{ж}} \text{ch}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)] + \\ & + \rho_{\text{ж}} A_2 k A_{\text{ж}} \text{sh}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)]; \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{P}}{\partial y} = & \rho_{\text{ж}} g \sin \gamma - \rho_{\text{ж}} \frac{A_2 \bar{V}_{\text{к}} + \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma}{\bar{\delta}} (x - x_0) - \\ & - i \rho_{\text{ж}} k^2 A_{\text{ж}} (A_{2y} + B_2) \text{sh}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)] - \\ & - i \rho_{\text{ж}} k \omega A_{\text{ж}} \text{sh}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)]. \end{aligned} \quad (71)$$

Система уравнений (70) и (71) имеет следующее решение общего вида:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\text{ж}} &= \rho_{\text{ж}} g[(y + \bar{\delta} + \tilde{\delta}) \sin \gamma + (x - x_0) \cos \gamma] + \\ &+ \rho_{\text{ж}} \frac{A_2 (\bar{V}_{\text{к}} + \bar{V}_{\text{св}} \sin \gamma)}{\bar{\delta}} (y + \bar{\delta} + \tilde{\delta})(x - x_0) - \\ &- i \rho_{\text{ж}} A_{\text{ж}} \omega - k (A_2 y - B_2) \operatorname{sh}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)] - \\ &- i \rho_{\text{ж}} A_2 A_{\text{ж}} \operatorname{sh}[k(y + \bar{\delta})] \exp[-i(\omega t - kx)] + c_2 \end{aligned} \quad (72)$$

где A_2 и B_2 – константы, определяемые выражениями (68) и (69), а C_2 – произвольная константа неявного вида.

Таким образом, получен второй ряд решений поставленной ранее задачи для слоя жидкого металла.

Для функции T из граничных условий задачи (10), (11), (13), (14), (15), (16) имеем:

$$\bar{q}_{\text{п}} \Big|_{y=\pm\bar{\delta}} = \bar{q}_{\text{ж}} \Big|_{y=\pm\bar{\delta}} + \rho_{\text{п}} \Gamma_{\text{к}} \bar{V}_{\text{к}}; \quad (73)$$

$$T \Big|_{y=\bar{\delta}} = T_{\text{к}}; \quad (74)$$

$$\bar{q}_{\text{ж}} \Big|_{y=-\tilde{\delta}} = \bar{q}_{\text{мс}} \Big|_{y=-\tilde{\delta}} + \rho_{\text{ж}} \Gamma_{\text{нл}} \bar{V}_{\text{нл}}; \quad (75)$$

$$T \Big|_{y=-\tilde{\delta}} = T_{\text{пл}}; \quad (76)$$

$$\bar{q}_{\text{тв}} \Big|_{y \rightarrow \infty} = -\lambda_{\text{тв}} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y \rightarrow -\infty}; \quad (77)$$

$$T \Big|_{y \rightarrow -\infty} = T_0. \quad (78)$$

Проведем подстановку решения (46) в уравнение (20), а решения (67) – в уравнения (24), в итоге получим:

для пара:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (A_1 y + B_1) \frac{\partial T}{\partial x} = a_{\text{п}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right); \quad (79)$$

для жидкого металла

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (A_2 y + B_2) \frac{\partial T}{\partial x} = a_{\text{ж}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right). \quad (80)$$

Следовательно, систему граничных условий и уравнений, которой должна удовлетворять скалярная функция T , составляют граничные условия (73) - (78), а также преобразованные выше уравнения (21), (80) и уравнение (28)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_{\text{тв}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right).$$

в которых параметры $a_{\text{п}}$, $a_{\text{ж}}$, $a_{\text{тв}}$ есть интегральные коэффициенты теплопроводности, соответственно для пара, жидкого металла и твердого металла, учитывающие как молекулярный, так и турбулентный механизм переноса тепла [6].

В первую очередь ищем решение задачи для области твердого металла. Из граничного условия (77) следует, что в общем случае для твердого металла скалярная функция T должна удовлетворять частному решению вида [7]:

$$T = A_3 \exp \left(\frac{\bar{q}_{\text{тв}}}{\lambda_{\text{тв}}} y \right) + B_3, \quad (81)$$

где A_3 и B_3 – произвольные константы, определяемые с помощью граничных условий (76), (78) следующим образом:

при $y \rightarrow -\infty$, $T_0 = B_3$;

при $y \rightarrow -\bar{\delta}$, $T_{\text{пл}} = A_3 \exp\left(-\frac{q_{\text{ТВ}}}{\lambda_{\text{ТВ}}}\bar{\delta}\right) + T_0$;

Окончательная подстановка значений констант A_3, B_3 в решение (81) позволяет получить:

$$T = (T_{\text{пл}} - T_0) \exp\left[\frac{q_{\text{ТВ}}}{\lambda_{\text{ТВ}}}(y + \bar{\delta})\right] + T_0. \quad (82)$$

С другой стороны, для области твердого металла скалярная функция T должна также удовлетворять частное решение вида [7]:

$$T = A_T f(y) \exp[-i(\omega t - kx)] + C_3, \quad (83)$$

где A_T – амплитуда тепловой волны, $f(y)$ – неизвестная функция, зависящая от координаты y , C_3 – произвольная константа.

Здесь следует отметить, что частное решение (83) описывает процесс распространения тепловой волны в сопряженной задаче пар–жидкость–твердый металл. В данном случае это решение эквивалентно зависимости (29), т.е. закону колебания границы раздела фаз между жидким металлом и паром. Эквивалентность (29) и (83) логически строго следует из физической модели колебаний задней стенки парогазового канала.

Подставляя решение (83) в уравнение (28), получаем:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \left(k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{ТВ}}}\right) f. \quad (84)$$

Это уравнение имеет единственное решение в виде $\exp[k_{\text{ТВ}}(y + \bar{\delta})]$, удовлетворяющее одновременно как граничному условию (76), так и граничному условию (78), т.е.

$$T = A_T \exp[k_{\text{ТВ}}(y + \bar{\delta}) - i(\omega t - kx)] + C_3 \quad (85)$$

Действительно, легко проверить, что при $y = -\bar{\delta}$ амплитуда тепловой волны максимальна и равна A_T , а при $y \rightarrow -\infty$ амплитуда тепловой волны падает до нуля и произвольная константа $C_3 = T_0$. Неизвестный коэффициент k_T в (85) определяет волновое число для тепловых колебаний. Проведем подстановку решения (85) в уравнение (28), в результате получим связь коэффициентов:

$$k_T = \sqrt{k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{ТВ}}}}. \quad (86)$$

Общее решение задачи для области твердого металла получается в результате комбинирования частных решений (82) и (84) с общей константой произвольного вида. При этом в решении (82) функция $\exp[\dots]$ заменяется первыми членами ряда Тейлора, т.е.

$$\exp\left[\frac{q_{\text{ТВ}}}{\lambda_{\text{ТВ}}}(y + \bar{\delta})\right] \cong 1 + \frac{q_{\text{ТВ}}}{\lambda_{\text{ТВ}}}(y + \bar{\delta}),$$

что является допустимым при решении задачи в линейном приближении.

Следовательно, общее решение задачи для области твердого металла имеет вид:

$$T = T_0 + (T_{\text{пл}} - T_0) \left[1 + \frac{q_{\text{ТВ}}}{\lambda_{\text{ТВ}}}(y + \bar{\delta})\right] + A_T \exp[k_{\text{ТВ}}(y + \bar{\delta}) - i(\omega t - kx)]. \quad (87)$$

Продолжая поиск общих решений задачи для областей жидкого металла и пара, снова обратимся к физической модели процесса. Известно, что перенос возмущений внутри парогазового канала протекает значительно интенсивнее поперек (координата x), чем вдоль канала (координата y). При этом, числовые оценки значений температурных градиентов по координатам различаются максимум на порядок, а минимум – сопоставимы между собой. Кроме того, распространение

тепловых возмущений по координате y осуществляется совместно механизмами турбулентного и молекулярного переноса, а по координате x – в дополнение к указанным механизмам переноса добавляется перенос тепла силами инерции потока пара или жидкого металла. В уравнениях (79) и (80) перенос тепла силами инерции потока массы вещества представлен соответственно членами уравнений:

$$(A_1 y + B_1) \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (A_2 y + B_2) \frac{\partial T}{\partial x},$$

которыми, как следует из физической модели процесса, при решении задачи в линейном приближении можно пренебречь. В этом случае потери в точности аппроксимации окончательных результатов решения задачи будут незначительны, а математические трудности решения будут в значительной мере устранены [6].

Во вторую очередь, ищем решение задачи для области жидкого металла в виде, аналогичном решению (87), т.к. существует аналогия между уравнением (28) и граничными условиями (74), (76), (78). Очевидно, что скалярная функция T должна удовлетворять здесь частному решению вида:

$$T = A_4(y + \bar{\delta}) + B_4, \tag{88}$$

где A_4 и B_4 – произвольные константы, определяемые с помощью граничных условий (74) и (76),

$$\begin{aligned} \text{при } y = -\bar{\delta}, \quad T_{\text{пл}} &= B_4; \\ \text{при } y = \pm \tilde{\delta}, \quad T_{\text{к}} &= A_4(\bar{\delta} \pm \tilde{\delta}) + T_{\text{пл}}. \end{aligned}$$

Подстановка значений констант A_4 , B_4 в решение (88) даёт:

$$T = \left[(T_{\text{к}} - T_{\text{пл}}) \left(\frac{y + \bar{\delta}}{\bar{\delta} \pm \tilde{\delta}} \right) \right] + T_{\text{пл}}. \tag{89}$$

Для области жидкого металла скалярная функция T должна также удовлетворять частному решению вида:

$$T = A_{\text{Тж}} f(y) \exp[-i(\omega t - kx)] + C_4, \tag{90}$$

где $A_{\text{Тж}}$ – амплитуда тепловой волны в жидком металле, $f(y)$ – неизвестная функция, C_4 – произвольная константа.

Подставляя решение (90) в уравнение (80), получаем:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \left(k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{ж}}} \right) f, \tag{91}$$

Уравнение (91) имеет решение в виде $\exp[k_{\text{Тв}}(y + \bar{\delta})]$, где $k_{\text{Тв}}$ – волновое число для тепловых колебаний в жидком металле, т.е. аналогично (85), (86) получаем выражения:

$$T = A_{\text{Тж}}(y) \exp[k_{\text{Тв}}(y + \bar{\delta}) - i(\omega t - kx)] + C_4, \tag{92}$$

$$k_{\text{Тж}} = \sqrt{k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{ж}}}}. \tag{93}$$

Решение (92) удовлетворяет граничным условиям (74) и (76). При $y = -\bar{\delta}$ амплитуда тепловой волны равна $A_{\text{Тж}}$ и произвольная константа $C_4 \cong T_{\text{пл}}$, а при $y = \pm \tilde{\delta}$ амплитуда тепловой волны возрастает приблизительно в $\exp(k_{\text{Тв}} \bar{\delta})$ раз.

Общее решение задачи для области жидкого металла получается в результате комбинирования частных решений (89) и (92) с общей константой комбинирования частных решений (89) и (92) с общей константой произвольного вида, т.е.

$$\begin{aligned} T = T_{\text{пл}} + (T_{\text{к}} - T_{\text{пл}}) \left(\frac{y + \bar{\delta}}{\bar{\delta} \pm \tilde{\delta}} \right) + \\ + A_{\text{Тж}} \exp[k_{\text{Тж}}(y + \bar{\delta}) + i(\omega t - kx)]. \end{aligned} \tag{94}$$

В последнюю очередь ищем решение задачи для парогововой области в виде, аналогичном решению (94), чтобы обеспечить преемственную связь решений при переходе через границу раздела фаз $y = \pm\tilde{\delta}$. Из физической модели процесса известно, что градиент температур при переходе через границу раздела фаз в пароговovou область резко возрастает, а температура плазмы в центре пароговового канала значительно превышает температуру конденсации паров металла. Проведем интегральную оценку градиента температур от поверхности раздела фаз для парогововой области. Радиус канала приблизительно равен $\tilde{\delta}$, минимальная и максимальная оценка перепада температур на этом участке равна $(5-9)T_k$, т.е.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=\pm\tilde{\delta}} \cong \frac{7T_k}{\tilde{\delta}}. \tag{95}$$

Оценку градиента температур (95) используем в качестве дополнительного граничного условия при решении задачи для парогововой области.

В данном случае функция T должна удовлетворять частному решению вида:

$$T = A_5(y - \tilde{\delta}) + B_5, \tag{96}$$

где A_5 и B_5 – произвольные константы, определяемые с помощью граничных условий (74) и (95), т.е.

$$B_5 = T|_{y=\pm\tilde{\delta}} = T_k, \tag{97}$$

$$A_5 = \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=\pm\tilde{\delta}} \cong \frac{7T_k}{\tilde{\delta}}. \tag{98}$$

Необходимо отметить, что здесь и ранее в тексте формализация границы раздела фаз в виде $y = +\tilde{\delta}$ означает присутствие положительной полуволны, а формализация в виде $y = -\tilde{\delta}$ – присутствие отрицательной полуволны жидкого металла в произвольном сечении $x = x_0$ рассматриваемой задачи.

Подстановка значений констант A_5, B_5 в решение (96) даёт:

$$T = \frac{7T_k}{\tilde{\delta}}(y - \tilde{\delta}) + T_k. \tag{99}$$

Для парогововой области скалярная функция T должна также удовлетворять частному решению вида:

$$T = A_{\text{ТП}} f(y) \exp[-i(\omega t - kx)] + C_5, \tag{100}$$

где $A_{\text{ТП}}$ – амплитуда тепловой волны в парогововой области, $f(y)$ неизвестная функция, C_5 – произвольная константа.

Подставляя решение (100) в уравнение (79) получаем:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \left(k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{П}}} \right) f. \tag{101}$$

Уравнение (101) имеет решение в виде:

$\exp[K_{\text{ТП}}(y - \tilde{\delta})]$ – для положительной полуволны и решение

$\exp[K_{\text{ТП}}(y + \tilde{\delta})]$ – для отрицательной полуволны на границе раздела фаз, где $k_{\text{ТП}}$ – волновое число тепловых колебаний в парогововой области,

$$k_{\text{ТП}} = \sqrt{k^2 - \frac{i\omega}{a_{\text{П}}}};$$

т.е. решение (100) будет иметь различный вид в зависимости от того, в каком месте будет сделано произвольное сечение $X = X_0$:

в области положительной полуволны, где $y = +\tilde{\delta}$, имеем

$$T = A_{\text{ТП}} \exp[K_{\text{ТП}}(y - \tilde{\delta}) - i(\omega t - kx)] + C_5, \tag{102}$$

в области отрицательной полуволны, где $y = -\tilde{\delta}$,

$$T = A_{\text{ТП}} \exp[K_{\text{ТП}}(y + \tilde{\delta}) - i(\omega t - kx)] + C_5, \quad (103)$$

в точках пересечения границы раздела фаз с прямой $y = 0$.

$$T = A_{\text{ТП}} \exp[K_{\text{ТП}}y - i(\omega t - kx)] + C_5. \quad (104)$$

Решения (102), (103), (104) удовлетворяют граничным условиям (74) и (95). При $y = +\tilde{\delta}$, $y = -\tilde{\delta}$ или $y = 0$ амплитуда тепловой волны равна $A_{\text{ТВ}}$ и произвольная константа $C_5 = T_k$, а при $y \cong \tilde{\delta}$ амплитуда тепловой волны возрастает в $\exp[k_{\text{ТП}}\tilde{\delta}]$ раз.

Общее решение задачи для парогазовой области получается в результате комбинирования частного решения (96) с частными решениями (102), (103), (103) при общей константе произвольного вида, т.е.

$$T = T_k + \frac{7T_k}{\delta}(y - \tilde{\delta}) + A_{\text{ТП}} \exp[K_{\text{ТП}}(y \mp \tilde{\delta}) - i(\omega t - kx)]. \quad (105)$$

Таким образом, получен полный ряд решений поставленной ранее задачи в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений: для парогазовой области – (20)-(23), для слоя жидкого металла – (24) - (27), для твердого металла – (28).

С помощью этих уравнений можно провести в линейном приближении анализ частоты колебаний границы раздела фаз пар-жидкий металл для различных металлов в зависимости от скорости сварки и мощности луча.

ლიტერატურა – REFERENCES - ЛИТЕРАТУРА

1. Григорьянц А. Г., Шиганов И.Н., Мисюрлов А.Н. Технологические процессы лазерной обработки: Учеб. пособие для вузов / Под ред. А. Г. Григорьянца. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. - 304с. : ил.
2. Вейко В.П., Петров А.А. Опорный конспект лекций по курсу «Лазерные технологии». Раздел: Введение в лазерные технологии. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2009 -143 с.
3. Самохин А.А. Влияние испарения на поведение расплава при лазерном воздействии на металлы // Квантовая электроника. -1983. – т. 10. с. 2022-2026.
4. Левченко Е.Б., Черняков А. Л. Неустойчивость капиллярных волн в неоднородно нагретой жидкости при воздействии лазерного излучения. Физика и химия обработки материалов. 1983, № 1, с. 129-130.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред. – ГИТТЛ, М., 1953. – 788 с.
6. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1973. – 847 с.
7. Артамонов К. И. Термогидроакустическая устойчивость. – М.: Машиностроение, 1982. – 261 с.
8. Джозеф Д. Устойчивость движений жидкости. – М.: Мир, 1981. – 635 с.
9. Методы расчета сопряженных задач теплообмена/Э.К. Калинин, Г.А. Дрейцер, В.В. Костюк, Н.Н. Берлин - М.: Машиностроение, 1983. – 232 с.

ლაზერული შედეგებისას ორთქლარიანი არხის უკანა კედლის რხევების მათემატიკური ანალიზი

მაღახუ ხუციშვილი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
რეზიუმე

გამოკვლეულია ორთქლარიანი არხის უკანა კედლის რხევები ორთქლის, თხევადი და მყარი ლითონის ურთიერთქმედების ამოცანის პროცესის საფუძველზე თბოგაცვლის, ფაზური გარდაქმნების და ტალღური მოძრაობის ჰიდროდინამიკის გათვალისწინებით. განტოლებების საშუალებით შესაძლებელია ხაზოვანი მიახლოებით რხევების სიხშირის ანალიზის ჩატარება ორთქლის და თხევადი ლითონის ფაზათა გამყოფ საზღვარზე, სხვადასხვა ლითონებისათვის შედეგების სინჯარისა და სხივის სიმძლავრისაგან დამოკიდებულებით.

MATHEMATICAL ANALYSIS OF VIBRATIONS OF REAR WALL OF STEAM-GAS CHANNEL DURING LASER WELDING

M.G. Khutsishvili

Georgian Technical University

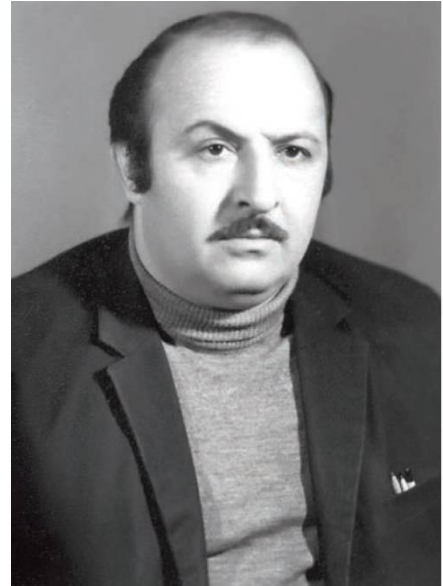
SUMMARY

Vibrations of rear wall of steam-gas channel are studied on the basis of solution of a task of steam-liquid-solid metal taking into account mutual effect of heat exchange, phase transition and hydrodynamics of wave motion. By means of equations is possible to make with linear approximation an analysis of vibration frequency of steam-liquid metal interface boundary for different metals depending on welding speed and beam power.

რაულ ჩაგუნავას ხსოვნა

საქართველოს ქიმიურმა საზოგადოებამ, დიდი დანაკლისი განიცადა-გარდაიცვალა გულმხურვალე მამულიშვილი, ღვაწლმოსილი მეცნიერი - რაულ ჩაგუნავა.

რაულ ჩაგუნავა დაიბადა 1938 წ. 24 ოქტომბერს ჭემშირის ინტელიგენტების ოჯახში. მამა-ვლადიმერ ჩაგუნავა ცნობილი მეცნიერი, ტექნიკის მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი, ფართო ერუდიციის ქიმიკოსი ინჟინერ-ტექნოლოგი იყო. ბატონი ვლადიმერის კვლევების საფუძველზე საერთაშორისო ქიმიურ ლიტერატურაში შევიდა ტექნოლოგიური აირების გაწმენდის „მანგანუმის მეთოდი“. ასევე მან დაადგინა სპილენძ-ამიაკის ხსნარებით ნახშირის ოქსიდის აბსორბციის ქიმიზმი და ნ.ჟავრონკოვთან ერთად გამოიყვანა ფორმულა, განტოლება, რომელიც მსოფლიო სამეცნიერო ლიტერატურაში ჟავრონკოვ-ჩაგუნავას ფორმულის სახელწოდებითაა ცნობილი. ბატონმა რაულმა მამის ხსოვნას და სამეცნიერო მოღვაწეობას პატივი მიაგო შესანიშნავი მონოგრაფიით



„ვლადიმერ ჩაგუნავა - მეცნიერი, ინჟინერი, პედაგოგი“; დედა - გალინა (გუგული) ასათიანი საქართველოში ერთ-ერთი პირველი ინჟინერ-ტექნოლოგი ქალი ბრძანდებოდა. იგი ოთხი ათეული წლის განმავლობაში წარმატებით მოღვაწეობდა უმაღლესი განათლების სფეროში.

თბილისის 53-ე საშუალო სკოლის ოქროს მედალზე დამთავრების შემდეგ რაულ ჩაგუნავა ჩაირიცხა მენდელეევის სახელობის მოსკოვის ქიმიური ტექნოლოგიის ინსტიტუტში, შემდეგ სწავლა განაგრძო საქართველოს პოლიტექნიკური ინსტიტუტის ქიმიური ტექნოლოგიის ფაკულტეტზე, რომელიც 1962 წელს დაამთავრა. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტზე იგი მეორე სპეციალობას დაეუფლა და 1967 წელს დაამთავრა მყარი სხეულის ფიზიკის სპეციალობით.

რაულ ჩაგუნავამ შრომითი საქმიანობა დაიწყო 1962 წელს ქ. რუსთავის აზოტის ქარხნაში ინჟინერ-ქიმიკოსად, ხოლო 1963 წლიდან მუშაობა განაგრძო არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტის დენის წყაროების ლაბორატორიაში ჯერ ინჟინრად, შემდეგ კი წამყვან მეცნიერ-თანამშრომლად. რაულ ჩაგუნავამ მეუღლესთან-ქალბატონ დალი ოტიაშვილთან და მეცნიერთა მცირე ჯგუფთან ერთად პროფ. ლევან ჯაფარიძის ხელმძღვანელობით საფუძველი ჩაუყარა კვლევების ახალ მიმართულებას: ჭიათურის მანგანუმის მადნებისა და კონცენტრატების ბაზაზე მნიშვნელოვანი ქიმიური პროდუქტის-ელექტროლიზური მანგანუმის დიოქსიდის (ემდ)-მიღების სამრეწველო ტექნოლოგიის დამუშავებასა და წარმოებაში დანერგვას. ემდ-ის მიღების ტექნოლოგიაში ძირითადი სირთულე ისეთი საანოდე მასალის შერჩევა იყო, რომელიც უზრუნველყოფდა მიღებული პროდუქტის მაღალ ხარისხს და წარმოების მაღალ ტექნიკურ-ეკონომიკურ მაჩვენებლებს, რასაც იმ დროს მსოფლიო მასშტაბით გამოყენებული ტყვიისა და გრაფიტის ანოდები ვერ აკმაყოფილებდა.

ბატონ რაულ ჩაგუნავას მიერ პერსპექტიულ საანოდე მასალად გამოყენებულ იქნა ტიტანი, რომლის პასივაციის თავიდან აცილება მოხერხდა ისეთი მეთოდებით, როგორცაა: ელექტროლიზის პროცესში ასიმეტრიული და რევერსიული დენის გამოყენება, ტიტანის ზედაპირზე მისივე კარბიდის თერმოდირფუზური ფენის დატანა, პროცესის დასაწყისში დაბალი სიმკვრივის ანოდური დენის გამოყენება და სხვ.

აღნიშნულ სამუშაოებზე მიღებული იქნა მრავალი საავტორო მოწმობა, რომლებიც მოგვიანებით საზღვარგარეთ (აშშ, გერმანია, ესპანეთი, ინდოეთი) დაპატენტდა.

ბატონ რაულ ჩაგუნავას უშუალო ხელმძღვანელობით ამ სამუშაოების დასრულება რუსთავის ქიმიკობინატში საბჭოთა კავშირსა და აღმოსავლეთ ევროპაში პირველი ემდ-ის მისაღები სამრეწველო წარმოების საფუძველი გახდა.

ბატონ რაულ ჩაგუნავას სადისერტაციო ნაშრომის თემას ემდ-ის ფიზიკურ-ქიმიური მახასიათებლების გამოკვლევა წარმოადგენდა. კვლევის საფუძველზე მის მიერ გამოყვანილი იქნა ფორმულები მანგანუმისა და სხვა გარდამავალი ელემენტების ოქსიდების სტანდარტული პოტენციალების გამოსათვლელად. დილატომეტრიული მეთოდით ემდ-ის თერმული დამუშავების დროს მან აღმოაჩინა ნიმუშების შეკუმშვისა და გაფართოების ეფექტები მტკიცედ ბმული წყლის მოცილების შედეგად მანგანუმის დიოქსიდის კრისტალური ფორმების ურთიერთგადასვლის პროცესში. თერმული ეფექტების და ელექტრული წინაღობის ერთობლივი შესწავლის შედეგად აჩვენა ჟანგბადისა და მტკიცედ ბმული წყლის განმსაზღვრელი გავლენა ემდ-ის ელექტრულ მახასიათებლებზე. უშუალოდ დენის წყაროსთან მიმართებაში რ.ჩაგუნავას მიერ შესრულებული სამუშაოებიდან აღსანიშნავია ემდ-ის დისპერსიულობისა და მანგანუმ-თუთიის სისტემის დენის წყაროს შიდა წნევის ცვლილების გავლენა გაღვანური ელემენტის ელექტროტექნიკურ მახასიათებლებზე.

ბატონმა რაულმა 1979 წელს არაორგანული ქიმიის და ელექტროქიმიის ინსტიტუტში ჩამოაყალიბა ქიმიისა და ტექნიკის ისტორიის ლაბორატორია, რომლის ძირითადი სამეცნიერო მიმართულება ქიმიისა და მისი მონათესავე დარგების ისტორიის კვლევა იყო.

ბატონმა რაულ ჩაგუნავამ ზუსტ მეცნიერებებში, კვლევების თანამედროვე მეთოდებში კარგად განსწავლულმა და განსაკუთრებული ანალიტიკური აზროვნებით დაჯილდოებულმა მკვლევარმა, ისტორიული პირველწყაროების - ძველი ხელნაწერების და საარქივო მასალების კვლევის საფუძველზე ჩამოაყალიბა და გამოაქვეყნა უმნიშვნელოვანესი ნაშრომები ასტრონომიის, მათემატიკის, ფიზიკის, ქიმიის, ფარმაციის, კალენდრის, ქრონოლოგიის, პალეოგრაფიის, გეოგრაფიის და სხვა დარგების განვითარების ისტორიული პროცესების შესახებ. მას გამოქვეყნებული აქვს 300-მდე სამეცნიერო ნაშრომი, მათ შორის 18 მონოგრაფია. ცალკე აღნიშვნის ღირსია მისი პედაგოგიური მოღვაწეობა, მისი ხელმძღვანელობით შესრულებულია 16 სადისერტაციო შრომა.

ფასდაუდებელია ბატონი რაულის ღვაწლი XIIIს. დიდი სასულიერო და საერო მოღვაწის ტბელი აბუსერისძის მათემატიკური, ასტრონომიული და კალენდრულ-პასქალური შინაარსის მოსაზრებების და დაკვირვებების შესწავლის და გამომზეურების საქმეში. ამ დიდი შრომის შედეგია თანავტორებთან ერთად 1998 წელს გამოცემული ფუნდამენტური მონოგრაფია „აბუსერისძე ტბელი. თხზულებანი“.

მეცნიერმა მრავალი კვლევა მიუძღვნა ბაგრატიონთა საგვარეულოს სახელოვანი წარმომადგენლების ცხოვრებასა და სამეცნიერო მოღვაწეობას, მათი კოლექტიური მმართველობის სისტემას, ტიტულატურის საკითხებს. ასევე წმინდა მეფის-დავით აღმაშენებლის ცხოვრების და მოღვაწეობის ბოლო ოთხწლეულის ქრონოლოგიას, რამაც ავტორს ფრიად საყურადღებო დასკვნების გაკეთების საშუალება მისცა საქართველოს ისტორიის გადამწყვეტი მოვლენის-დიდგორის ბრძოლის ამჟამად დამკვიდრებული თარიღის გადახედვის თაობაზე.

რაულ ჩაგუნავამ 4 მონოგრაფია მიუძღვნა გამოჩენილი სახელმწიფო მოღვაწის, განმანათლებელი მეფის ვახტანგ VI-ის (1675-1737წწ.) საბუნებისმეტყველო სამეცნიერო მემკვიდრეობის შესწავლას და პოპულარიზაციას. ამ საკითხებს ეძღვნება წიგნები: „ვახტანგ ბაგრატიონის საბუნებისმეტყველო-სამეცნიერო მოღვაწეობა (არითმეტიკა)“, „ვახტანგ ბაგრატიონის საბუნებისმეტყველო-სამეცნიერო მოღვაწეობა (საბუნებისმეტყველო დარგები და ტექნიკა)“. მკვლევარმა დაადგინა, რომ ვახტანგ VI-ის მიერ ქიმიის დარგში შესრულებული სამუშაოები იმ დროისათვის სხვადასხვა ქვეყნის ქიმიური რეცეპტების და საკუთარი ექსპერიმენტებისა და დაკვირვების სახით თავმოყრილია სახელმძღვანელოდ გათვალისწინებულ ნაშრომში „წიგნი ზეთების შეზავებისა და ქიმიისა ქმნის“, რომელიც ევროპულ ტექნოლოგიურ სახელმძღვანელოებს ჰგავს და ქართული სამეცნიერო მწერლობის ერთ-ერთ გამორჩეულ ძეგლს წარმოადგენს. ბატონმა რაულმა შეძლო ვახტანგის „ქიმიის“ ძირითადი ტექსტის დადგენა, ცალკეული პარაგრაფების შინაარსის განმარტება, დებულება-კომენტარების დაზუსტება. 2013 წელს კვლევების შედეგები გამოსცა თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტმა რუბრიკით „პირველი ქართული წიგნი ქიმიაში“.

რაულ ჩაგუნავამ თანამოაზრეებთან ერთად გამოავლინა, რომ გამოჩენილ საზოგადო მოღვაწეს და ქიმიკოსს პეტრე ბაგრატიონს (1818-1876წწ) ეკუთვნის დენის გარეშე მოოქროების წესის შემუშავება, რომელიც ქიმიური აღდგენის მეთოდის ანალოგიით, განსხვავებით ჩვეულებრივი ჩაყურსვის წესისაგან, საგრძნობლად სქელი ოქროს დანაფარის მიღებას უზრუნველყოფს. პ.ბაგრატიონმა შეიმუშავა სპილენძის ფენის წინასწარი გამოლექვის გარეშე თუჯის მოოქროების

ორიგინალური გალვანოსტეგიური წესი. ასევე მოპოვებული იქნა მტკიცებულება, რომ მან პრაქტიკულად ერთ-ერთმა პირველმა სამეცნიერო პრაქტიკაში დაიწყო გალვანური დენის გავლენის შესწავლა მცენარეთა ზრდაზე. კვლევების საფუძველზე ბატონმა რაულ ჩაგუნავამ დაამტკიცა, რომ გერმანელი ქიმიკოსი ელსენერი, რომელსაც ზოგიერთი მეცნიერი სამეცნიერო ლიტერატურაში ოქროს ციანიდებსა და ფეროციანიდებში ხსნადობის აღმოჩენის პრიორიტეტს ანიჭებდა, სინამდვილეში პ.ზაგრატიონის მიერ უფრო ადრე გამოქვეყნებული სტატიით ხელმძღვანელობდა.

ბატონი რაულის კოლეგებთან ერთად შესრულებულ ნაშრომში „პეტრე ზაგრატიონი-გამოჩენილი მეცნიერი და საზოგადო მოღვაწე“ ნაჩვენებია, რომ ოქროს, ვერცხლის და სპილენძის კალიუმის ციანიდსა და ფეროკალიუმის ციანიდში ხსნადობის აღმოჩენით, მოოქროების ორიგინალური წესების შემუშავებით, პირველი მშრალი გალვანური ელემენტის კონსტრუირებით და მისი პრაქტიკული გამოყენებით, პ.ზაგრატიონმა ქიმიის ისტორიაში სამართლიანად დაიმკვიდრა გამოჩენილი მეცნიერის სახელი.

ბატონმა რ.ჩაგუნავამ მნიშვნელოვანი წვლილი შეიტანა მსოფლიო დონის ქიმიკოსის, დღესაც უაღრესად მაღალი ციტირების ინდექსის მქონე, რეპრესირებული პროფესორის შალვა ცინცაძის(1900-1937წწ.) მეცნიერული მემკვიდრეობის შესწავლის, მისი წარმოჩენის და მისთვის მეცნიერებაში კუთვნილი ადგილის დამკვიდრების საქმეში.

ბატონმა რაულმა აღმოაჩინა ევროპის წამყვან ჟურნალებში დაბეჭდილი პროფ. შ.ცინცაძის რამდენიმე უცნობი სამეცნიერო წერილი და ისინი ქართულ ენაზე გამოაქვეყნა. მასვე ეკუთვნის მოლიბდენის ლურჯი რეაქტივის ისტორიის გარჩევა დასაბამიდან „ცინცაძის რეაქტივამდე“ და ამ რეაქტივის შესაძლებლობების დადგენა ფოსფორშემცველი ნაერთების ანალიზის პროცესში. თანაავტორებთან ერთად, მეცნიერების ისტორიის დარგში 2015წ. საკონკურსოდ წარმოდგენილი საუკეთესო ნაშრომებისათვის „შალვა ცინცაძის მეცნიერული მემკვიდრეობა“ და „შალვა ცინცაძე-გამოჩენილი ქართველი მეცნიერი“ მას მიენიჭა საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის პრემია.



2005 წელს რაულ ჩაგუნავა აირჩიეს საქართველოს საინჟინრო აკადემიის საპატიო აკადემიკოსად, ხოლო მეცნიერულ კვლევებში მიღწეული წარმატებებისათვის 2006 წელს დასახელდა წლის საუკეთესო მეცნიერად და იუნესკოს ეგიდით დაჯილდოვდა მედლით.

მრავალრიცხოვანი და თემატურად მრავალფეროვანია თემები და საკითხები, რომლებიც ბატონი რაულის მიერაა შესწავლილი და გამოკვლეული, მათი დიდი ნაწილი კი რომელიც მან ხელახალი განსჯის საგნად აქცია დაუსრულებელი დარჩა.

რაულ ჩაგუნავას მთელი მოღვაწეობა სამშობლოს სიყვარულითაა ნასაზრდოები. სწორედ ამან განაპირობა მისი წასვლა აფხაზეთში ბატალიონ „თბილისელის“ შემადგენლობაში-საქართველოს ტერიტორიული მთლიანობის დასაცავად (1992-93წწ). იგი იყო ომისა და შრომის ვეტერანი.

ძნელია წარსულ დროში ისაუბრო ბატონი რაულის შესახებ. იგი იყო მრავალმხრივი ნიჭით დაჯილდოებული, ენციკლოპედიური ცოდნის, მასშტაბური აზროვნების და გამორჩეული პიროვნული თვისებების მქონე, შესანიშნავი მეუღლე, მამა, პაპა, გულისხმიერი მეგობარი. იგი არასოდეს ისწრაფოდა კომფორტისა და რეგალიების მოსაპოვებლად. გასაოცარი იყო მისი შრომისმოყვარეობა, უაღრესი პუნქტუალობა, შეუპოვრობა და პრინციპულობა მეცნიერული კვლევების დროს. ამ შესანიშნავი მეცნიერისა და პიროვნების მრავალმხრივი სამეცნიერო მემკვიდრეობის გაცნობა ფართო საზოგადოებას ჯერ კიდევ მოელოს.

მთელი თავისი მოღვაწეობის მანძილზე ბატონ რაულს ღირსეულად ედგა მხარში მისი შესანიშნავი მეუღლე, ნიჭიერი მეცნიერ-ქიმიკოსი, ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორი, არაერთი პუბლიკაციის ავტორი, ქალბატონი დალი ოტიაშვილი. მან უდიდესი როლი შეასრულა ბატონი რაულის მრავალმხრივი მეცნიერული კვლევების წარმატებულად განხორციელებაში. ბატონ რაულს დარჩა შესანიშნავი მემკვიდრეები: უფროსი შვილი მაია მშობლების კვალს გაჰყვა, უმცროსი

ქეთევანი მედიცინის დოქტორია. შვილიშვილებიდან ლიკა- უმაღლეს განათლებას ეუფლება, ხოლო გივი კი იურისტია.

ძნელია ასეთი ღირსეული, ნიჭიერი, გულწრფელი ადამიანის, ჭეშმარიტი მეცნიერის გარდაცვალებასთან შეგუება, თუმცა მასზე მოგონება მუდამ იქნება, მისი სამეცნიერო მემკვიდრეობა კი თაობებს დარჩება.

*საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიის განყოფილება
რ. აგლაძის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტი
საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ჟურნალი მაცნე, ქიმიის სერიის სარედაქციო კოლეგია*

CONDOLENCE

The Department of Chemistry and Chemical Technologies of the National Academy of Sciences of Georgia, staff of the R.I.Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry, and the editorial board of the Proceedings of the National Academy of Sciences of Georgia, Chemical series, are saddened to inform of passing of a protean scientist, doctor of chemical sciences, honorary member of the Academy of Engineering Sciences of Georgia, Raul Chagunava, and are extending their deepest condolences to his family and friends.

СОБОЛЕЗНОВАНИЕ

Отделение химии и химической технологии Национальной Академии наук Грузии, коллектив Института неорганической химии и электрохимии им.Р.И.Агладзе и редакционная коллегия серии химической Известий Национальной Академии наук Грузии извещают о смерти доктора химических наук , многогранного учёного, почётного члена Инженерной академии Грузии Рауля Владимировича Чагунава и выражают искреннее соболезнование семье и близким покойного.

ავთანდილ დოლიძის ხსოვნას



ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის პეტრე მელიქიშვილის სახელობის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი, საქართველოს ქიმიური საზოგადოება ღრმა მწუხარებას გამოთქვამს ღვაწლმოსილი მეცნიერის, შესანიშნავი მამულიშვილისა და კოლეგის, უაღრესად გულთბილი და სიკეთით სავსე ადამიანის, ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის, პროფესორის ავთანდილ დოლიძის გარდაცვალების გამო.

ქართველ მეცნიერთა რიგებს გამოაკლდა დიდი შრომისმოყვარეობითა და შემოქმედებითი ნაყოფიერებით გამორჩეული, მეცნიერების ორგანიზების უნარით დაჯილდოებული მკვლევარი, რომლის მეცნიერული მუშაობა ათეული წლების განმავლობაში მიმართული იყო ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების სხვადასხვა დარგში.

ღრმა ცოდნის, კრეატიული აზროვნების წყალობით მუდამ ავლენდა დროის გამოწვევებით განპირობებულ სიტუაციებში ადეკვატური მოქმედების უნარს. თავისი ცხოვრების წესით ყოველთვის დროის მოთხოვნების დონეზე იყო. მან მნიშვნელოვანი წვლილი შეიტანა ნატიფი ორგანული სინთეზის, ქიმიური ეკოლოგიის, სახიფათო ნარჩენების უტილიზაციისა და დაბინძურებული გარემოს რეაბილიტაციის

ტექნოლოგიების მეცნიერული საფუძვლების შექმნასა და პრაქტიკულ გამოყენებაში.

ავთანდილ დოლიძემ სამეცნიერო კვლევა დაიწყო საქართველოს პოლიტექნიკური ინსტიტუტის ქიმიური ტექნოლოგიის ფაკულტეტზე სწავლის დროს. იმ პერიოდში შესრულებულია ექსპერიმენტები მზა მწვანე ჩაის ლუმინესცენტული ანალიზის დარგში. აღნიშნული ინსტიტუტი წარჩინებით დაამთავრა 1963 წელს, ხოლო 1964 წლიდან დაიწყო მუშაობა საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის პ. მელიქიშვილის სახ. ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტში მეცნიერ თანამშრომლად, 1972 წლიდან - ინსტიტუტის სწავლულ მდივანად, 1980 წლიდან - დირექტორის მოადგილედ სამეცნიერო დარგში, 2005 წლიდან - დირექტორად, ხოლო 65 წლის შესრულებასთან დაკავშირებით გადადგა ადმინისტრაციული თანამდებობიდან და 2006 წლის ბოლოს არჩეული იყო ინსტიტუტის სამეცნიერო საბჭოს თავმჯდომარედ დღემდე.

მისი ადრეული პერიოდის შრომების ძირითადი ნაწილი ეძღვნება ორმაგი ბმის შემცველი ციკლური ნაერთების სინთეზისა და გარდაქმნების შესწავლას. საკანდიდატო დისერტაცია მან მოამზადა და დაიცვა ქ. მოსკოვში, ნ. ზელინსკის სახ. ორგანული ქიმიის ინსტიტუტში თემაზე: „ციკლოპთანის რიგის ნახშირწყალბადების კატალიზური გარდაქმნები ალუმოსილიკატურ კატალიზატორებზე“ (Moscow, Russia, 1972).. ამავე დროს ა. დოლიძემ გაიარა კვალიფიკაცია საკავშირო სპექტროსკოპიის ცენტრში.

შემდგომ ადოლიძემ განაგრძო სამუშაოები ქ. თბილისში ციკლოოლეფინების სინთეზის ახალი მეთოდების შემუშავებისა და სხვადასხვა ფუნქციონალური ჯგუფების შემცველი ციკლური ნაერთების მიღების მიმართულებით. მის მიერ დამუშავებულია რუსთავის ქიმიური კომბინატის „აზოტი“-ს ნახევარპროდუქტ – ციკლოპექსანოლიდან ერთ სტადიად მეთილ ციკლოპენტენების მიღების ეფექტური მეთოდი, რომელიც გამოიცადა საწარმოო მასშტაბით დადებითი შედეგებით. ასევე დამუშავებულია ციკლანებიდან ჟანგვითი დეჰიდრირებით შესაბამისი ციკლოოლეფინების მიღების ხერხი. მის მიერ შესწავლილია ხუთ- და ექვსწევრიანი ციკლოოლეფინების გარდაქმნები სინთეზურ და ბუნებრივ ალუმოსილიკატებზე, მათ მოდიფიცირებულ ფორმებზე. შემდგომი სამუშაოები მიეძღვნა ამ ციკლოოლეფინების ფუნქციონალიზაციას კარბონილირების, ჰიდროფორმილირების, ჰიდროფოსფორილირების და სხვა რეაქციების დახმარებით, შედეგად მიღებულია მთელი რიგი ახალი ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებები, ნახევარპროდუქტები ნატიფი ორგანული სინთეზისათვის. აღნიშნული სამუშაოები დაედო საფუძვლად ავთანდილ დოლიძის სადოქტორო დისერტაციას თემაზე: „ციკლოოლეფინების კატალიზური სინთეზი და

გარდაქმნები“, რომელიც მან დაიცვა 1988 წელს (Moscow, Russia, 1988), შემდგომ 1990 წელს უმაღლესმა საატესტაციო კომისიამ მას მიანიჭა პროფესორის სამეცნიერო წოდება სპეციალობით „ორგანული ქიმია“ (Moscow, Russia, 1990).

ა.დოლიძის სამუშაოების მომდევნო ციკლი მიეძღვნა ბუნებრივი ბიოლოგიურად აქტიური ნივთიერებების (მწერების კომუნიკაციის საშუალებები) სინთეზური ანალოგების მიღების მეთოდების შემუშავებას, მათ საფუძველზე სათანადო ტექნოლოგიის შექმნასა და საცდელი წარმოების ორგანიზაციას. მან თანამშრომელთა ჯგუფთან ერთად შეძლო რამოდენიმე წლის განმავლობაში აეთვისებინა საქართველოს სოფლის მეურნეობისა და ტყის ძირითადი მავნებლების (ყურძნის ჭია, აღმოსავლეთის, ქლიავის და ვაშლის ნაყოფჭამიები, არაფარდა პარკმხვევია, მბეჭდავი ქერქიჭამია, კალიფორნიის ფარიანა და სხვა) სასქესო ფერომონების სინთეზის სქემები, მოხდინა მათი ოპტიმიზაცია და დაემზადებინა სქესმჭერის კომპლექტები ქვეყნისთვის აუცილებელი რაოდენობით.



ფერომონების სინთეზის გამოცდილების საფუძველზე შემდგომ შემუშავდა მწერების მეტამორფოზის იუვენალური ჰორმონის ანალოგების – იუვენოიდების მიღების სქემები. დამუშავდა ევროპაში გამოყენებული იუვენოიდის – ფენოქსიკარბის მიღების ახალი ოპტიმალური სქემა, ასევე პოტენციური იუვენოიდების მიღების მეთოდები 2,4-დინური მჟავებისა და გერანიოლის საფუძველზე. ბუნებრივი ნივთიერებების ანალოგების სინთეზის დროს ა. დოლიძე სულ უფრო მეტად იყენებდა განახლებადი მცენარეული ნედლეულის – ეთერზეთების კომპონენტებს. მათგან საინტერესო კომფიგურაციის სინტონების მიღება ხელს შეუწყობს საქართველოში ნატიფი ორგანული სინთეზის ნედლეულის ბაზის გაფართოებას.

ამ საუკუნის დასაწყისში საქართველოს მთავრობის დავალებით ა.დოლიძემ დიდი ყურადღება დაუთმო საბჭოთა არმიის გასვლის შემდგომ ქვეყნის ტერიტორიაზე დატოვებული ტოქსიკური ნივთიერებების უტილიზაციის საკითხებს. ეუთო-ს გრანტით სამუშაო ჯგუფმა ა.დოლიძის ხელმძღვანელობით შეასრულა წარმატებული პროექტი საქართველოში დატოვებული რაკეტული საწვავის კომპონენტის (450 ტ) „მელანჟი“-ს ნეიტრალიზაციისათვის. მის მიერ მრავალტონაჟიანი ტოქსიკური ნარევის განეიტრალეზისათვის მოწოდებულ იქნა ჩვეულებრივ გამოყენებული კაუსტიკური სოდის ნაცვლად ჩამქრალი კირი, რომლის გამოყენებამ შესაძლებელი გახადა საველე პირობებში ნეიტრალიზაციის ეფოთერმული პროცესის ჩატარება განზავებულ ხსნარებში იძულებითი გაცივების გარეშე, მეორადი სასარგებლო პროდუქტის ე.წ. „ნორვეგიული გვარჯილა“-ს მიღებით. მეთოდმა დაიმსახურა საერთაშორისო სამეცნიერო საზოგადოების მაღალი შეფასება და ამ პროცესს ეწოდა „ქართული მოდელი“, იგი საქართველოს შემდეგ გამოყენებულ იქნა საწარმოო მასშტაბით სხვა ქვეყნებში, კერძოდ სომხეთში 800 ტონამდე „მელანჟი“-ს გადასამუშავებლად.

2002 წელს „საქართველოს ქიმიური ეკოლოგიის დარგის განვითარებაში, ყოფილი სამხედრო ტერიტორიების რეაბილიტაციისა და მაღალტოქსიკური ნარჩენების უტილიზაცია-გაუვნებელყოფის ღონისძიებათა წარმატებით განხორციელებაში შეტანილი განსაკუთრებული წვლილისათვის“ ა.დოლიძე დაჯილდოვდა ვახტანგ გორგასლის III ხარისხის ორდენით, ხოლო 2005 წელს სომხეთისათვის გაწეული დახმარებისათვის გადაეცა სომხეთის მთავრობის ჯილდო.

2006-2008 წლებში ეუთო-ს გრანტებით ჩატარდა საქართველოში დატოვებული 100 ტონაზე მეტი სხვადასხვა სახიფათო ნარჩენის: ნაპალმის, სადეგაზაციო და იმიტაციური სითხეების, ბოლწარმომქმნელი კონტეინერების და მრავალი სხვა უსაფრთხო და ეკოლოგიურად მისაღები გაუვნებელყოფა. საქართველოს თავდაცვის სამინისტროს ობიექტებიდან ათეული წლის განმავლობაში დაგროვილი მრავალფეროვანი გამოუყენებელი და გამოუსადეგარი სამხედრო აღჭურვილობის გაუვნებელყოფისათვის აუცილებელი გახდა სხვადასხვა რაციონალური ტექნოლოგიის შექმნა და გამოყენება.

ა.დოლიძე ნაყოფიერად მუშაობდა დაბინძურებული ყოფილი სამხედრო ბაზების, განსაკუთრებით სამხედრო აეროდრომების რეაბილიტაციის დარგში. მის მიერ შემუშავებული იყო ხელმისაწვდომი, რაციონალური, კომპლექსური ტექნოლოგია კომპოსტირებისა და მიკრობიოლოგიური მეთოდის შერწყმით. დაბინძურების მონიტორინგთან ერთად განხორციელდა ათეულობით ჰექტარზე

სამხედრო ბაზების ნიადაგის აღდგენა ადგილობრივი (აბორიგენული) მიკროორგანიზმების გააქტიურებისათვის ოპტიმალური პირობების შექმნით. ა.დოლიძე ავითარებდა იდეას მცირე ქვეყნებისათვის დაბინძურებული ადგილების ნაკლებხარჯიანი ეფექტური რემედიაციის მეთოდის შესამუშავებლად ადგილობრივი მასალების მაქსიმალური გამოყენებით.



ა.დოლიძე პირადად მონაწილეობდა ნატო-ს მიერ ორგანიზებულ საერთაშორისო კონფერენციებში (პორტუგალია, ბელგია, გერმანია, ლატვია, ესტონეთი, ბულგარეთი), ხოლო 2006 წელს მისი თაოსნობით ქ. თბილისში იქნა ორგანიზებული რეგიონალური გარემოსდაცვითი კონფერენცია (EUCOM-PFP). ა.დოლიძე აღიარებული სპეციალისტი იყო სამხედრო ეკოლოგიის დარგში და მას ხშირად იწვევდნენ სხვადასხვა ქვეყნებში საერთაშორისო ტექნიკური ექსპერტიზისათვის (Armenia 2005-2007; Kazakhstan 2005; Ukraine 2005; Tender of Kazakhstan Vienna 2006; Tender of Ukraine Vienna – 2009)

მთლიანობაში ა.დოლიძის სამეცნიერო მოღვაწეობა ქიმიისა და ქიმიური ტექნოლოგიების დარგში, ორგანული ქიმიისა და ქიმიური ეკოლოგიის მიმართულებით სისტემურ მუშაობასთან ერთად მოიცავდა ჩვენს ქვეყანაში წარმოქმნილი 'სახიფათო' ქიმიური პრობლემების გადაწყვეტას.

2007 წელს ა.დოლიძეს თანამშრომლებთან ერთად მიენიჭა საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის პეტრე მელიქიშვილის სახელობითი პრემია შრომათა ციკლისათვის 'საქართველოს ქიმიური ეკოლოგიის ზოგიერთი პრობლემის კვლევა და გადაჭრა'.

მეცნიერული კვლევა-ძიების გარდა, ავთანდილ დოლიძე ეწეოდა ნაყოფიერ პედაგოგიურ მუშაობას. იგი მეცნიერული კადრების გულისხმიერი, მომთხოვნი აღმზრდელი იყო და ყოველმხრივ ეხმარებოდა მათ შემდგომ სამეცნიერო წინსვლაში. მისი ხელმძღვანელობით დაცულია 28 საკანდიდატო დისერტაცია.

ავთანდილ დოლიძის ავტორობით შესრულებულია 200-ზე მეტი სამეცნიერო ნაშრომი და 22 პატენტი გამოგონებაზე.

მაღალი ნიჭი, შრომისმოყვარეობა, პრინციპულობა, პასუხისმგებლობა, საქმიანობის ყველა ეტაპზე და სიტუაციაში, ადამიანებზე ზრუნვის მომადლებული უნარი, ეროვნული ტრადიციებისადმი ერთგულება ერთ მთლიანობაში ქმნიდა მის პიროვნულ მომხიბვლელობას, რაც საზოგადოებაში უქმნიდა ლიდერის იმიჯს. ძნელია და დღესაც გვიჭირს იმასთან შეგუება, რომ ჩვენს შორის აღარ არის ბატონი ავთანდილი.

გვჯერა, რომ ავთანდილ დოლიძე მარად იცოცხლებს ჩვენს ხსოვნაში და დიდხანს ემახსოვრებათ ქართველ მეცნიერებს და ქართველ საზოგადოებას.

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

CONDOLENCE

The Ivane Javakhishvili Tbilisi State University and the Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry announce the death of an outstanding scientist and public figure, doctor of chemical sciences, professor Avtandil Dolidze, and are extending their deepest condolences to his family, friends, and collaborators.

СОБОЛЕЗНОВАНИЕ

Тбилисский государственный университет им. И.Джавахишвили и Институт физической и органической химии им. П.Г.Меликишвили извещают о смерти выдающегося учёного и общественного деятеля, доктора химических наук, профессора Автандила Вахтанговича Долидзе и выражают искреннее соболезнование семье, друзьям и сотрудникам 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 პასუხისმგებელმდივანთან, 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 რეფერატურულ ჟურნალში (ქართულ და ინგლისურ ენებზე) სტატიის რეფერირებისათვის ავტორი ვალდებულია გაითვალისწინოს შინაარსობრივი რეზიუმეების მომზადება ორივე ენაზე.

სარედაქციო კოლეგიასთან შეთანხმებული საფასური უნდა იყოს გადარიცხული სსიპ საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის ანგარიშზე, მიმღები ბანკი – სახელმწიფო საზინა, მიმღების დასახელება – საზინის ერთიანი ანგარიში, ბანკის კოდი – TRESGE22, მიმღების სახაზინო კოდი – 708777499, დანიშნულება – ჟურნალ “მაცნე” ქიმიის სერიაში სტატიის გამოქვეყნების ჰონორარი. აუცილებელია მიეთითოს ავტორის გვარი ვინც იხდის თანხას.

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 Treasury of Georgia (bank code TRESGE22) on the account of the Georgian National Academy of Sciences (receiver code 708777499).

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 Казначействе Грузии (код банка TRESGE22, код получателя 708777499).