



ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი

ქიმიის დეპარტამენტის 2013 წლის სამეცნიერო ანგარიში

ემერიტუსი ნოდარ ლეკიშვილი

ქიმიის დეპარტამენტის სტრუქტურა:

1. ზოგადი, არაორგანული და მეტალორგანული ქიმიის მიმართულება

- ასოცირებული პროფესორი ავთანდილ ქორიძე
- ასოცირებული პროფესორი მიხეილ გვერდწითელი
- ასისტენტ პროფესორი ქრისტინა გიორგაძე
- მასწავლებლები, ქ.მ.კ-ბი მარინა გახუტიშვილი და ლალი ტურიაშვილი

ინსტიტუტები:

არაორგანულ–ორგანული ჰიბრიდული ნაერთების და არატრადიციული მასალების ს/კ ინსტიტუტი (დირექტორი ნ. ლეკიშვილი)
3 განყოფილება და 1 ჯგუფი; 11 თანამშრომელი

მეტალორგანული ქიმიის ინსტიტუტი (დირექტორი ა. ქორიძე)
4 განყოფილება; 21 თანამშრომელი

2. ორგანული ქიმიის მიმართულება

- სრული პროფესორი, აკადემიკოსი შოთა სამსონია
- ასოცირებული პროფესორი, ქ.მ.დ. იოსებ ჩიკვაიძე (დეპარტამენტის ხარისხის უზრუნველყოფის სამსახურის უფროსი)
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.დ. როზა კუბლაშვილი
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.დ. მარინა ტრაპაიძე

ინსტიტუტი:

ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი (დირექტორი შ. სამსონია)
6 განყოფილება, 19 თანამშრომელი

3. ფიზიკური და ანალიზური ქიმიის მიმართულება

- სრული პროფესორი, აკადემიკოსი ბეჟან ჭანკვეტაძე
- ემერიტუს-პროფესორი, ქ.მ.დ. ჯუმბერ კერესელიძე
- ასოცირებული პროფესორი, ქ.მ.დ. მარინა რუხაძე
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.დ. გიორგი ბეზარაშვილი
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.კ. ნინო თაყაიშვილი

ინსტიტუტი:

ფიზიკური და ანალიზური ქიმიის ინსტიტუტი (დირექტორი ბ. ჭანკვეტაძე)
35 თანამშრომელი

4. მაკრომოლეკულების ქიმიის მიმართულება

- სრული პროფესორი ქ.მ.დ. ომარ მუკბანიანი
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.კ. მ. ქარჩხაძე

ინსტიტუტი:

მაკრომოლეკულების ქიმიისა და პოლიმერული კომპოზიციების ინსტიტუტი
(დირექტორი ო. მუკბანიანი), 4 განყოფილება, 18 თანამშრომელი

5. ბიოორგანული ქიმიის მიმართულება

- სრული პროფესორი, ქ.მ.დ. რამაზ გახოკიძე
- ასისტენტ პროფესორი, ქ.მ.დ. ნელი სიდამონიძე

ინსტიტუტი:

ბიოორგანული ტექნოლოგიების ინსტიტუტი (დირექტორი რ. გახოკიძე)
3 განყოფილება, 23 თანამშრომელი

-
- 2013 წელს შესრულებული სამეცნიერო სამუშაოების გარშემო მოსმენილი იქნა *18 სამეცნიერო მოხსენება*.
 - 2013 წელს მოსმენილ იქნა 6 დოქტორანტის სამეცნიერო მოხსენება.
 - *ქიმიის დეპარტამენტის აკადემიური პერსონალი:*
 - 2 ემერიტუსი - ნოდარ ლეკვიშვილი, ჯუმბერ კერესელიძე
 - 4 სრული პროფესორი, 4 ასოცირებული პროფესორი
 - 7 ასისტენტ პროფესორი და 2 მასწავლებელი;
 - მათ შორის: 12 ქიმიის მეცნ. დოქტორი, 3 ქიმიის მეცნ. კანდიდატი
 - წლების განმავლობაში მოქმედებს *ნორჩ ქიმიკოსთა სკოლა და საბავშვო უნივერსიტეტი*, რომელსაც 2013 წლიდან ხელმძღვანელობს ე. მარქარაშვილი

დეპარტამენტის ძირითადი სამეცნიერო მიმართულებები:

ზოგადი, არაორგანული და მეტალორგანული ქიმიის მიმართულება

- თემა 1: “სპირტების კატალიზური დეჰიდრირება”

(თემის ხელ-ი: *ავთანდილ ქორიძე, ასოცირებული პროფესორი, ქ.მ.დ.*)

- თემა 2: „პირდაპირი მოქმედების ახალი მულტიფუნქციური ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების შექმნა და ტესტირება“

(პროექტის ხელმძღვანელი: *ნოდარ ლეკიშვილი, ემერიტუსი, ქიმ.მეცნ.დოქტორი*
თემის ხელ-ი და პასუხისმგებელი შემსრულებელი:

ხათუნა ბარბაქაძე, ქიმიის დოქტორი)

- თემა 3: „გამოსავალი ნივთიერებების მიღება დარიშხანშემცველი

სამრეწველო ნარჩენებიდან სხვადასხვა ბიოაქტიური ნაერთების წარმოების მიზნით“ (თემის ხელ-ი *მაია რუსია, ქიმიის მეცნ. კანდიდატი*)

ორგანული ქიმიის მიმართულება

- თემა 1: “გამოკვლევები ინდოლის ახალი ნაწარმების სინთეზის მიზნით”
(თემის ხელ-ი : აკადემიკოსი შოთა სამსონია)
- თემა 2: „ფიშერის ალდეჰიდების ბის-ანალოგების სინთეზი ვილსმაიერის რეაქციის პირობებში და დიპროლოქინოქსალონის რიგის ტრიმეთილური ციანინის წარმოქმნა”
(თემის ხელ-ი: მარინა ტრაპაიძე, ქ.მ.დ., ასისტენტ პროფესორი)
- თემა 3: “კვლევები ადამანტანის ფრაგმენტის შემცველი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების სინთეზის მიმართულებით”
(თემის ხელ-ი: დავით ზურაბიშვილი, ქ.მ.კ.)
- თემა 4: “ცილების N-გლიკოზილირება”
(თემის ხელ-ი: როზა კუბლაშვილი, ქ.მ.დ., ასისტენტ პროფესორი)

ფიზიკური ქიმიის და ანალიზური ქიმიის მიმართულება

- **თემა 1: “მოლეკულათშორისი ქირალური გამოცნობის ფიზიკურ-ქიმიური მექანიზმების კვლევა თხევად ფაზაში”**
(თემის ხელ-ი: აკადემიკოსი ბეჟან ჭანკვეტაძე)
- **თემა 2: “ასიმეტრიული კატალიზი”**
(თემის ხელ-ი: აკადემიკოსი ბეჟან ჭანკვეტაძე)
- **თემა 3: ეკოლოგია – “The chiral triazole fungicide difenoconazole: absolute stereochemistry, stereoisomer bioactivity, aquatic toxicity and environmental behavior in vegetable and soil**
(თემის ხელ-ი: აკადემიკოსი ბეჟან ჭანკვეტაძე)
- **თემა 4: “ შებრუნებულ მიცელებში ჩაჭერილი წყლის სტრუქტურული ცვლილებების შესწავლა”**
(თემის ხელ-ი: მარინა რუხაძე, ქ.მ.დ., ასოცირებული პროფესორი)
- **თემა 5: “ამინომჟავების თვისებების ქვანტურ-ქიმიური დახასიათება”**
(თემის ხელ-ი: ჯუმბერ კერესელიძე, ემერიტუსი, ქ.მ.დ.)

მაკრომოლეკულების ქიმიის მიმართულება

- *თემა: “მყარი პოლიმერული ელექტროლიტები”
(თემის ხელ-ი: ომარ მუკბანიანი, პროფესორი, ქ.მ.დ.)*

ბიოორგანული ქიმიის მიმართულება

- *თემა: “ნიტროზო (NO) ჯგუფის შემცველი ნახშირწყლების წარმოებულების სინთეზი”
(თემის ხელ-ი: რ. გახოკიძე, პროფესორი, ქ.მ.დ.)*

2013 წელს ქიმიის დეპარტამენტის მიერ გამოქვეყნებული სამეცნიერო პუბლიკაციების რაოდენობა

- ❖ იმპაქტ-ფაქტორის მქონე ჟურნალებში – 25
- ❖ საზღვარგარეთ გამოქვეყნებული პუბლიკაციები
(არა იმპაქტ ფაქტორის მქონე)
 - რეფერირებად და რეცენზირებად ჟურნალებში – 26
 - თავი საზღვარგარეთ გამოქვეყნებულ მონოგრაფიაში - 23
- ❖ მონოგრაფიები - 6
- ❖ რესპუბლიკურ სამეცნიერო ჟურნალებში - 21
- ❖ კონფერენციის თეზისები:
 - საერთაშორისო კონფერენციაზე – 46
 - რეგიონალურ კონფერენციაზე – 17
- ❖ სახელმძღვანელოები, სალექციო კურსების ელექტრონული ვერსიები,
რომელთა ნახვა შესაძლებელია უნივერსიტეტის საიტზე - 9

❖ *2013 წელს დეპარტამენტის თანამშრომლების მიერ მიღებული გრანტები (ინდივიდუალური და საკონფერენციო გრანტების ჩათვლით) - 14*

2013 წელს მოქმედი გრანტების რაოდენობა - 8

❖ *ყველა მიმართულებაზე ტარდებოდა სამეცნიერო სემინარები.*

❖ *სამეცნიერო კავშირები: აშშ, გერმანია, იტალია, საფრანგეთი, ესპანეთი, ლიტვა, საბერძნეთი, ჩინეთი, ინდოეთი, რუსეთი, უკრაინა, აზერბაიჯანი, სომხეთი.*

ერთობლივი სამეცნიერო პუბლიკაციების რიცხვი - 22

❖ *სხვა მნიშვნელოვანი წარმატება: პროფ. რ. გახოკიძის მიერ შექმნილი აგროპრეპარატი 2013 წელს ვაუჩერული სისტემით გავრცელდა საქართველოს სოფლის მეურნეობაში.*

დეპარტამენტის ოთხმა თანამშრომელმა მიიღო
სახელმწიფო ჯილდო “ღირსების ორდენი”:

შოთა სამსონია
ნოდარ ლეკიშვილი
იოსებ ჩიკვაიძე
ჯუმბერ კერესელიძე

ჩატარებული სამეცნიერო კვლევების ანოტაციები

ზოგადი, არაორგანული და მეტალორგანული ქიმიის მიმართულება

არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული ნაერთების და
არატრადიციული მასალების ს/კ ინსტიტუტი

ინსტიტუტის დირექტორი და სამეცნიერო მიმართულების ხელ-ლი,
ქიმიის მეცნ. დოქტორი, ემერიტუსი
ნოდარ ლეკიშვილი

პროექტი: არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული ნაერთების სინთეზი
და მათ ბაზაზე არატრადიციული მასალების მიღება

თემა 1: „პირდაპირი მოქმედების ახალი მულტიფუნქციური ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების შექმნა და ტესტირება“

თემის ხელ-ლი და პასუხისმგებელი შემსრულებელი: ხათუნა ბარბაქაძე, ქიმიის დოქტორი

➤ მრეწველობის და ტექნიკის ინტენსიურმა განვითარებამ დღეისათვის აქტუალური გახადა კომპლექსური თვისებების მქონე სხვადასხვა დანიშნულების პოლიმერული კომპოზიციური მასალების შექმნა. ამ მიმართულებით მნიშვნელოვანი როლი ეკისრება ჰეტეროჯაჭვურ პოლიმერებს და მათ ბაზაზე მულტიფუნქციური ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების შექმნას, რაც სხვადასხვა ბუნებრივი, სინთეზური და ხელოვნური მასალისგან დამზადებული მთელი რიგი ნაკეთობების მავნე მიკროორგანიზმებისა და სოკოებისგან დასაცავად არის გამიზნული.

➤ ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრებისთვის ბიოაქტიურ კომპონენტად გამოყენების მიზნით, დასინთეზებულია ახალი ტიპის, მაღალ რეაქციისუნარიანი და ძლიერ ფარმაკოფორული, პოლიფუნქციური ასიმეტრიული ფრაგმენტისა და ფეროცენის ჯგუფის შემცველი ბიოაქტიური ლიგანდები და მათ ბაზაზე გარდამავალი მეტალების ჰეტერომეტალური კოორდინაციული ნაერთები.

➤ ძირითად ჯაჭვში ორგანული და არაორგანულ-ორგანული ფრაგმენტების შემცველი პოლიფუნქციური პოლიმერების სტრუქტურის ფიზიკური და/ან ქიმიური მოდიფიკაციისთვის, ტრიბოლოგიური თვისებების გაუმჯობესების მიზნით, გამოყენებულ იქნა ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი. შერჩეულ არამოდიფიცირებულ და მოდიფიცირებულ პოლიმერულ მატრიცებში ბიოაქტიური მეტალორგანული და კოორდინაციული ნაერთების დოპირებით.

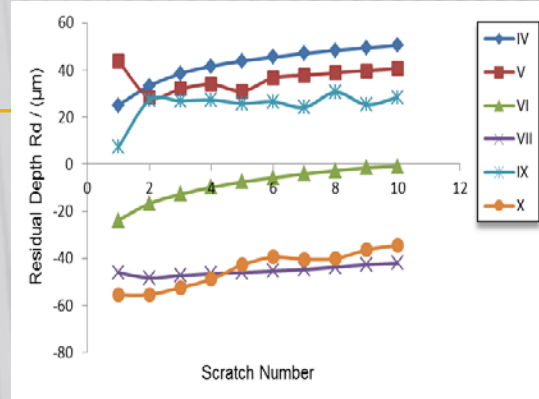
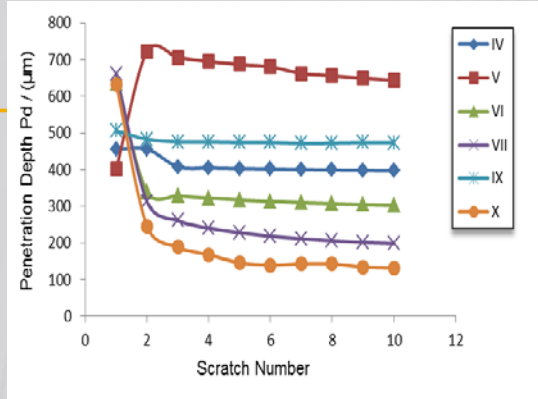
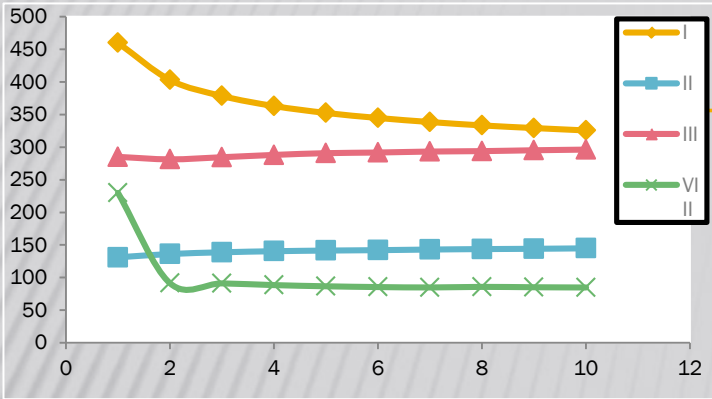
➤ დამზადებულია ხანმოკლე და ხანგრძლივი მოქმედების, მულტიფუნქციური არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული მასალები. დადგენილია გამოყენებული ბიოაქტიური ნაერთების და პოლიმერების ბუნებისა და კონცენტრაციის, რეცეპტორული და ტექნოლოგიური ფაქტორების გავლენა მიღებული მასალების თვისებებზე. შესწავლილია ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების ძირითადი ფიზიკურ-მექანიკური (*ადჰეზიური სიმტკიცე*) და საექსპლუატაციო მახასიათებლები [ტრიბოლოგიური თვისებები (*კაწვრადობა, ხახუნისა და ცვეთისადმი მდგრადობა*)]; დადგენილია მათი ჟანგვითი, თერმოჟანგვითი, ფოტოქიმიური, თერმოდაბერებისადმი, ე.წ. შუქამინდისა და ტენის შთანთქმისუნარიანობისადმი მდგრადობა.

➤ გამოკვლევებით დადგენილია, რომ სილიციუმორგანული ოლიგომერით მოდიფიკაცია წარმატებით შეიძლება გამოყენებულ იქნას პოლიმერების ტრიბოლოგიური თვისებების გასაუმჯობესებლად.

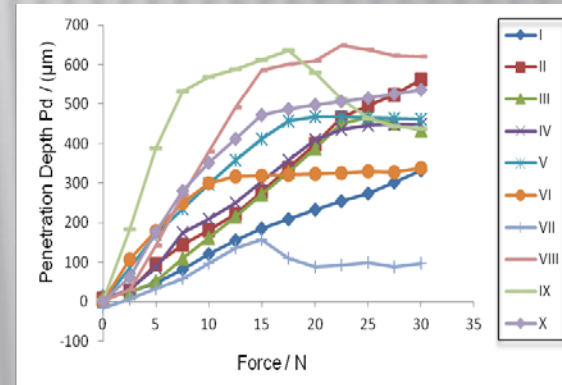
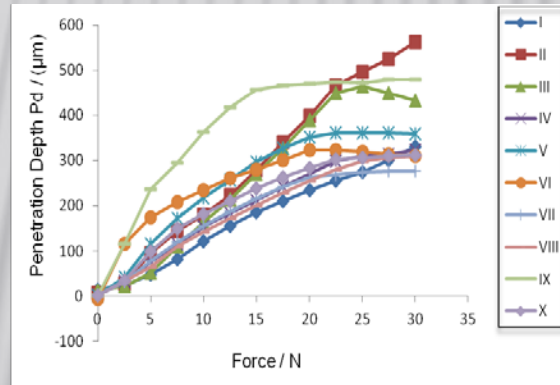
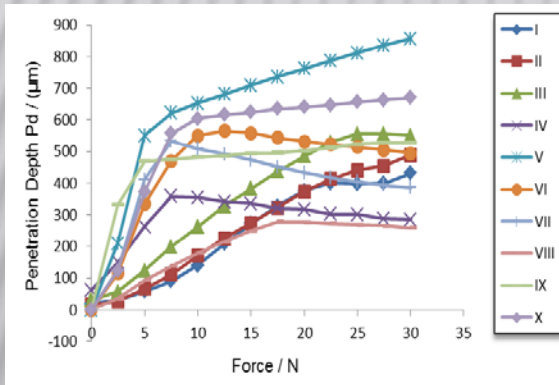
ცხრილი 1. პოლიმერული კომპოზიტები და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრები არამოდიფიცირებული და მოდიფიცირებული პოლიეპოქსიდისა, პოლიურეთანების და ბიოაქტიური ნაერთების ბაზაზე

I	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე
II	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი
III	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 5% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი
IV	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმლ
V	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 5% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმლ
VI	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმკ
VII	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 5% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმკ
VIII	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 10% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი
IX	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 10% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმლ
X	ორგანული ეპოქსიდი „ბისფენოლ A“-ს ბაზაზე / 10% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმკ

1	პოლიესთერურეთანი “PU”
2	გოგირდმემცველი პოლიესთერურეთანი “PUS”
3	გოგირდმემცველი პოლიესთერურეთანის იონომერი “PUSI”
4	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261”
5	პოლიურეთანი “BUTYP T-261” / 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიმეთილსილოქსანი
6	პოლიურეთანი “BUTYP T-261” / 3% α,ω-დიჰიდროქსიმეთილვინილოლიგოორგანოსილოქსანი
XI	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261”
XII	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261” /3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი
XIII	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261”/ 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი/3%ზმლ
XIV	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261”/ 5% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმლ
XV	პოლიურეთანი “BUTYP-T-261” / 3% ბის(ჰიდროქსიალკილ)პოლიდიმეთილსილოქსანი / 3% ზმკ



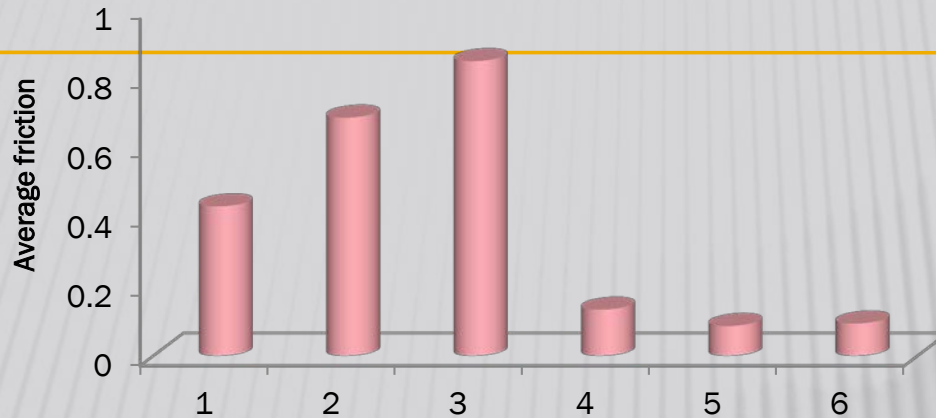
ნახაზი 1. არამოდიფიცირებული და მოდიფიცირებული პოლიექსიდეების ბაზაზე დამზადებული არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების მრავალრიცხოვანი კაწვრადობის ტესტირება



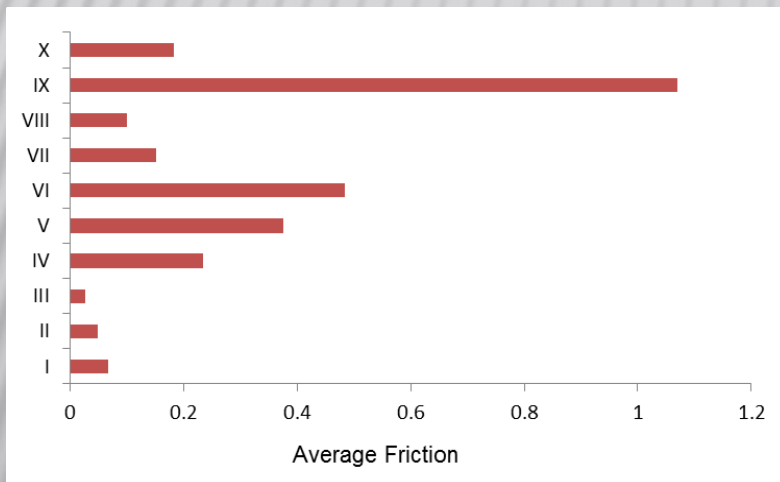
ნახაზი 2. არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების კაწვრადობის პროგრესული ტესტირება

ნახაზი 3. არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების პლასტმასაზე ადჰეზიის უნარის შესწავლა / კაწვრადობის პროგრესული ტესტირება

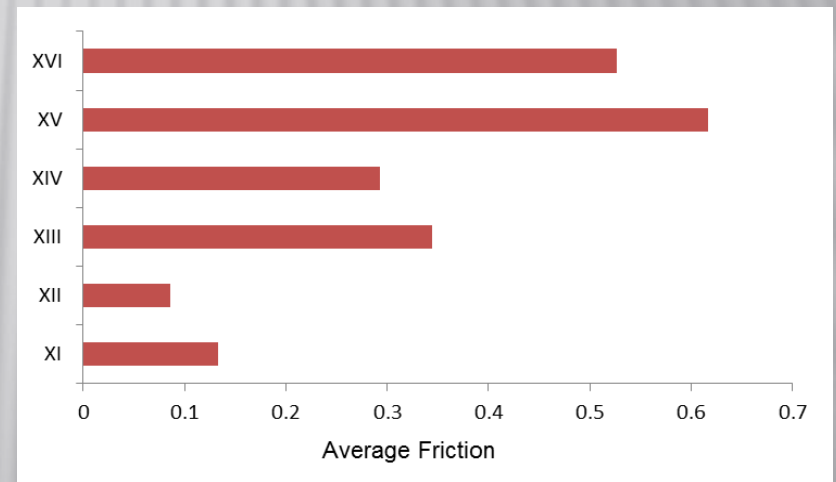
ნახაზი 4. არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების ხეზე ადჰეზიის უნარის შესწავლა / კაწვრადობის პროგრესული ტესტირება



ნახაზი 5. პოლიურეთანების ბაზაზე დამზადებული პოლიმერული კომპოზიტების საშუალო დინამიური ხახუნის კოეფიციენტის მნიშვნელობათა შედარება



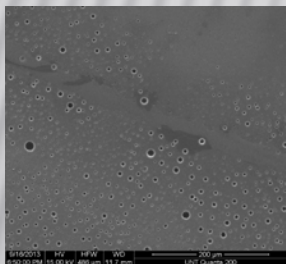
ნახაზი 6. პოლიეპოქსიდების ბაზაზე დამზადებული პოლიმერული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების საშუალო დინამიური ხახუნის კოეფიციენტის მნიშვნელობათა შედარება



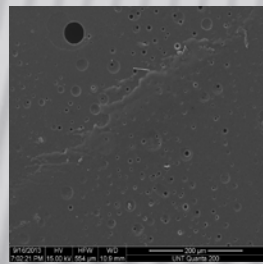
ნახაზი 7. პოლიურეთანის “BUTYP-T-261” ბაზაზე დამზადებული პოლიმერული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების საშუალო დინამიური ხახუნის კოეფიციენტის მნიშვნელობათა შედარება

ცხრილი 2. არამოდიფიცირებული და მოდიფიცირებული პოლიმერების ბაზაზე დამზადებული პოლიმერული კომპოზიტებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების წყალშთანქმისუნარიანობა

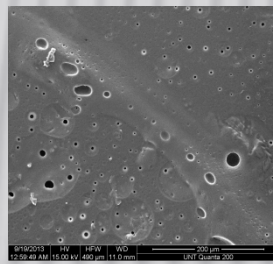
პოლიმერული კომპოზიტი	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
წყალშთანქმისუნარიანობა, % T=293K	0.001	0.001	0.008	0.005	0.001	0.007	0.005	0.005
პოლიმერული კომპოზიტი	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI
წყალშთანქმისუნარიანობა, % T=293K	0.002	0.001	0.01	0.01	0.001	0.004	0.01	0.002



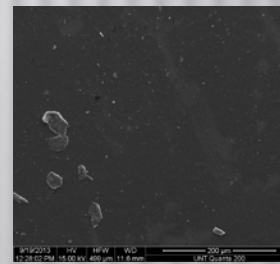
IV – 200 μm



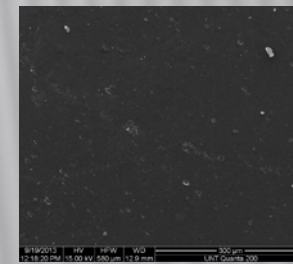
VII– 200 μm



X– 200 μm



XIV– 200 μm



XV– 300 μm

სქემა 1. არამოდიფიცირებული და მოდიფიცირებული პოლიექსიდების და პოლიურეთანების ბაზაზე დამზადებული არაორგანულ-ორგანული ჰიბრიდული მასალებისა და ანტიბიოკოროზიული დამცავი საფრების ზედაპირის მორფოლოგია

მიღებული ბიოაქტიური კომპოზიტების გამოყენების სფეროები

- მრეწველობის სხვადასხვა სფეროში პოლიმერულ მასალათა ბიოლოგიური რღვევისა და არაკონტროლირებადი ბიოდეგრადაციისგან მათ დასაცავად;
- იმ მიკროორგანიზმების ზრდის ინჰიბირების მიზნით, რომლებიც ადამიანებსა და ცხოველებში ანთებით დაავადებათა გამომწვევ ფაქტორებს წარმოადგენენ;
- სამუზეუმო ექსპონატების და კულტურული მემკვიდრეობის დასაცავად.

საჭიროებისამებრ, შესაძლებელი იქნება ზოგიერთი დამცავი საფრის მოხსნა ნიმუშის ზედაპირიდან მისი დაზიანების გარეშე, რაც განსაკუთრებით აქტუალურია სამუზეუმო ექსპონატებისა და არქეოლოგიური ნიმუშების დაცვის დროს.

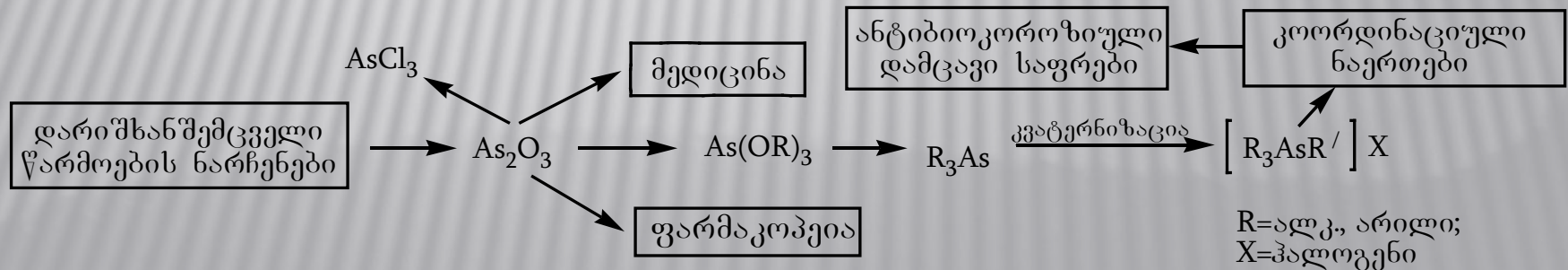
მადლობას ვუხდით პროფ. ვიტოლდ ბროსტოუს (აშშ, ნორდ ტეხასის უნივერსიტეტი) კომპოზიტების ტრიბოლოგიური თვისებების შესწავლაში გაწეული დახმარებისათვის

თემა 2: “საწყისი ნაერთების მიღება დარიშხანშემცველი წარმოების ნარჩენებიდან სხვადასხვა ბიოაქტიური ნივთიერებების წარმოების მიზნით”

შემსრულებლები: ქრისტინა გიორგაძე, მაია რუსია, ნელი საღარაძე

დარიშხანშემცველი წარმოების ნარჩენების გარდაქმნა პრაქტიკულად მნიშვნელოვან, სპეციფიკური თვისებების მქონე ნაერთებად გამოყენებითი ქიმიის ერთ-ერთ აქტუალურ პრობლემას წარმოადგენს. აღნიშნული პრობლემის წარმატებით გადაჭრა შექმნის არა მარტო ნედლეულის ახალ ბაზას, არამედ გადაჭრის მნიშვნელოვან ეკოლოგიურ პრობლემას – დაიცავს გარემოს დარიშხანშემცველი წარმოების ნარჩენებით დაბინძურებისგან.

სამთო-ქიმიური ქარხნის წარმოების ნარჩენებიდან, კერძოდ, რეალგარ(As_4S_4)-აურიპიგმენტური- (As_4S_6) მადნის გამოწვით მიღებული კუდებიდან დარიშხანის ექსტრაქცია განხორციელდა უმაღლესი ნაჯერი ერთატომიანი სპირტებით აზეოტროპული შრობის მეთოდით. აღნიშნული მეთოდი ეფუძნება წარმოების ნარჩენებთან გამოყენებული სპირტების ურთიერთქმედების მაღალ სელექტიურობას. მიღებული მაღალი კონდიციის დარიშხანოვანი მჟავას ეთერები $(RO)_3As$ წყალხსნარებში განიცდიან ჰიდროლიზს “თეთრი დარიშხანისა” (გამოსავლიანობა 86-91%) და შესაბამისი სპირტის წარმოქმნით. მიღებული სპირტი კვლავ შეიძლება გამოყენებულ იქნას ექსტრაგენტად, - ამგვარად, პროცესი ციკლური და უწყვეტი ხდება. სპირტიანი ექსტრაქტები შეიძლება გამოყენებულ იქნას, როგორც გამოსავალი ნივთიერება, ბარიუმის და სტრონციუმის ჰიდროარსენატების მისაღებად, რომლებიც გამოიყენება მედიცინაში, კერძოდ, ჰომეოპათიაში და ვეტერინარიაში ანტჰელმინთებად. შესწავლილ იქნა მიღებული ოქსო-ნაერთების გამოყენების შესაძლებლობა:



თემა. Hg-1223 მაღალტემპერატურულ ზეგამტარში ფაზის ფორმირებასა და ზეგამტარულ თვისებებზე დარიშხანისა და სტიბიუმის შემცველი ნაერთების დოპირების გავლენის გამოკვლევა

სასწავლო-სამეცნიერო ლაბორატორიის გამგე თეა ლობჯანიძე
ფუნდამენტური კვლევებისათვის სახელმწიფო სამეცნიერო გრანტი, რესფ

Sb_2O_3 დანამატიანი $HgBa_2Ca_2Cu_3O_y$ ნიმუშების მიღების პროცესი

HgO, BaO, $CaCO_3$, CuO რეაგენტები გამოყენებულ იქნა საკონტროლო $HgBa_2Ca_2Cu_3O_y$ და Sb-ით დოპირებული ნიმუშების დასამზადებლად.

რეაგენტები BaO, $CaCO_3$, CuO, Sb_2O_3 პროპორციით Ba:Ca:Cu:Sbx 2:2:3:X გადაიფქვა და გამოიწვა ღუმელში. აღუნდის ტიგელებში (განსაზღვრულ ტემპერატურაზე და განსაზღვრული დროით) ფხენილების გამოწვის შემდგომ მოხდა მათი დაპრესვა ტაბლეტების სახით და კვლავ გამოწვა ღუმელში. გამომწვარი ტაბლეტი გადაიფქვა და HgO ფხენილთან ერთად აირია. მიღებული ფხენილი დაიპრესა ტაბლეტის სახით და მოთავსდა კვარცის ამპულაში. კვარცის ამპულიდან ამოიქაჩა 10-4 გორი ჰაერი და დაიხურა. შემდგომ მოხდა მისი გამოწვა ღუმელში მაღალ ტემპერატურაზე. გამოწვის შემდგომ, მიღებული ტაბლეტის დაჯანგობა მოხდა 300-600°C ჰაერზე ღუმელში. მიღებულ ნიმუშებში ფაზების სისუფთავე შემოწმდა რენტგენო-ფაზური ანალიზის (რფა) მეშვეობით. კრიტიკული ტემპერატურა გაიზომა ამთვისებლობის ნამდვილი და წარმოსახვითი ნაწილების გაზომვის შედეგად. კრიტიკული დენები გაიზომა მაღალი ჰარმონიკების მეთოდის გამოყენებით. არადოპირებულ და დოპირებულ ნიმუშებში მაგნიტური ველებისა და დენების გადანაწილების კვლევები ჩატარდა ამთვისებლობის ნამდვილი და წარმოსახვითი ნაწილების და მაღალი ჰარმონიკების გაზომვის საშუალებით.

შესწავლილ იქნა:

1. არადოპირებული და Sb-ით დოპირებული ნიმუშების რენტგენოფაზური ანალიზი.
2. ამთვისებლობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.
3. მაღალი ჰარმონიკების დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.
4. კრიტიკული დენის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.
5. მაგნიტური ველებისა და დენების განაწილება ნიმუშებში.

ჩატარებულმა კვლევებმა აჩვენა, რომ მცირე დოზით Sb-ით დოპირებულ ნიმუშში საგრძნობლად გაიზარდა კრიტიკული დენის სიმკვრივე.

მეტალორგანული ქიმიის სამეცნიერო-კვლევითი ინსტიტუტი

ინსტიტუტის დირექტორი: ავთანდილ ქორიძე
ქიმიის მეცნ. დოქტორი, ასოცირებული პროფესორი

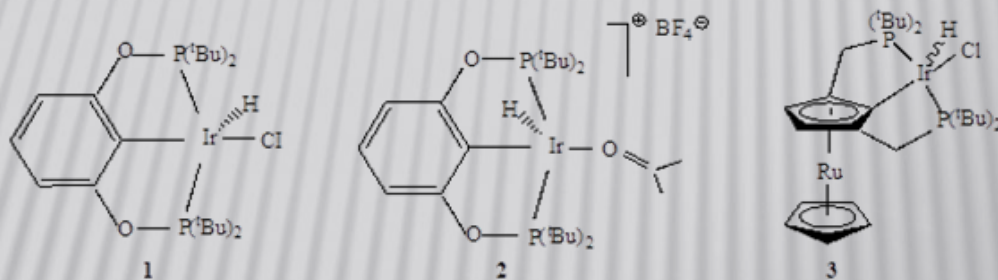
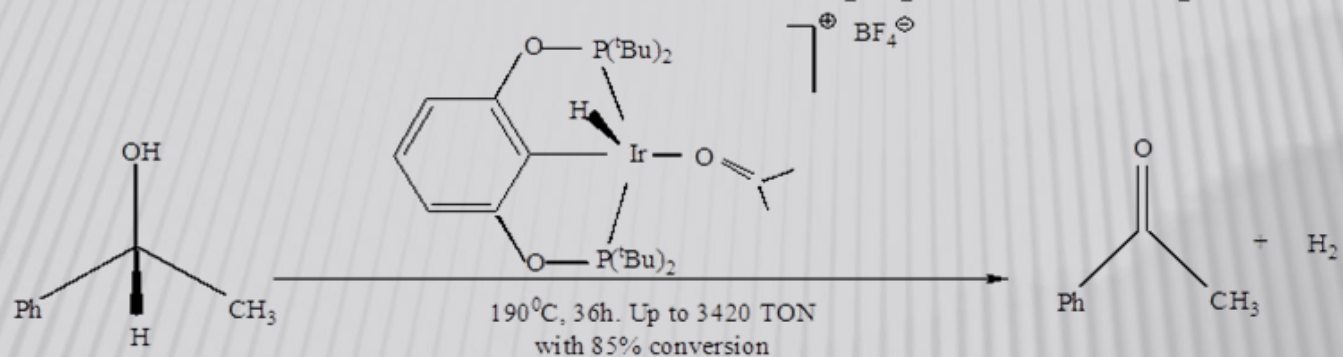
პროექტი: სპირტების კატალიზური დეჰიდრირება

შესწავლილია სპირტების კატალიზური დეჰიდრირება სამი პინსერული ირიდიუმის კომპლექსით, $\text{IrH}(\text{Cl})[2,6-(t\text{-Bu}_2\text{PO})_2\text{C}_6\text{H}_3]$ (1), $\{\text{IrH}(\text{აცეტონი})[2,6-(t\text{-Bu}_2\text{PO})_2\text{C}_6\text{H}_3]\}\{\text{BF}_4\}$ (2) და $\text{IrH}(\text{Cl})[\{2,5-(t\text{-Bu}_2\text{PCH}_2)_2\text{C}_5\text{H}_2\}\text{Ru}(\text{C}_5\text{H}_5)]$ (3), როგორც „სამსხვერპლო“ წყალბადის აქცეპტორის დასწრებით, ასევე მის გარეშე. მეორადი სპირტების დეჰიდრირება მიმდინარეობს კატალიზურად; 1-ფენილეთანოლის უაქცეპტორო დეჰიდრირებისთვის პროდუქტიულობა (TON) აღწევს 3420. პირველადი სპირტები ადვილად განიცდიან დეკარბონილირებას უკვე ოთახის ტემპერატურაზე, კატალიზურად პასიური 16e ადუქტების Ir-CO მიღებით. დეტალურად არის შესწავლილი ამ ტრანსფორმაციის მექანიზმი, განსაკუთრებით ეთანოლის მაგალითზე; გამოყოფილი და დახასიათებულია ახალი ინტერმედიატები.

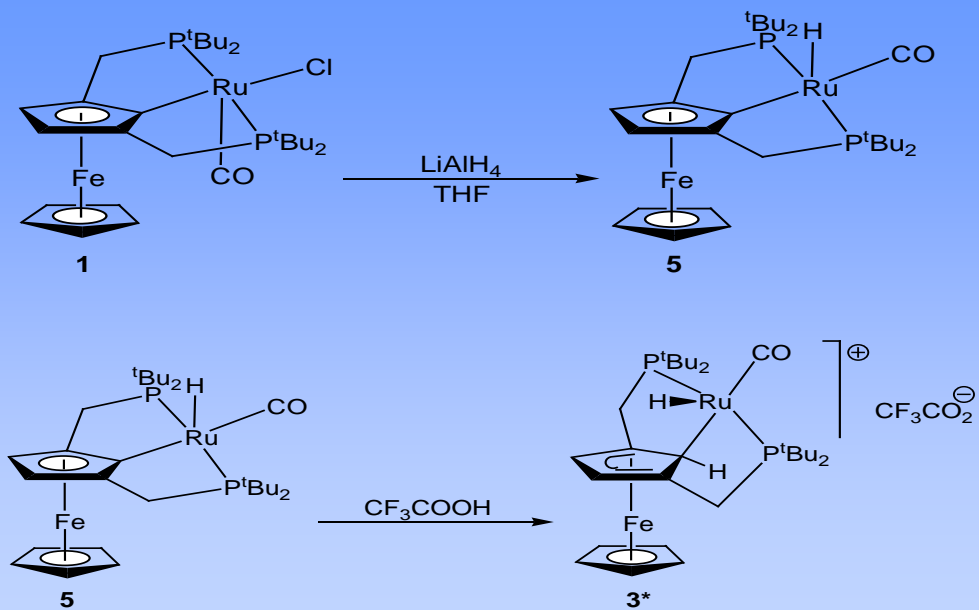
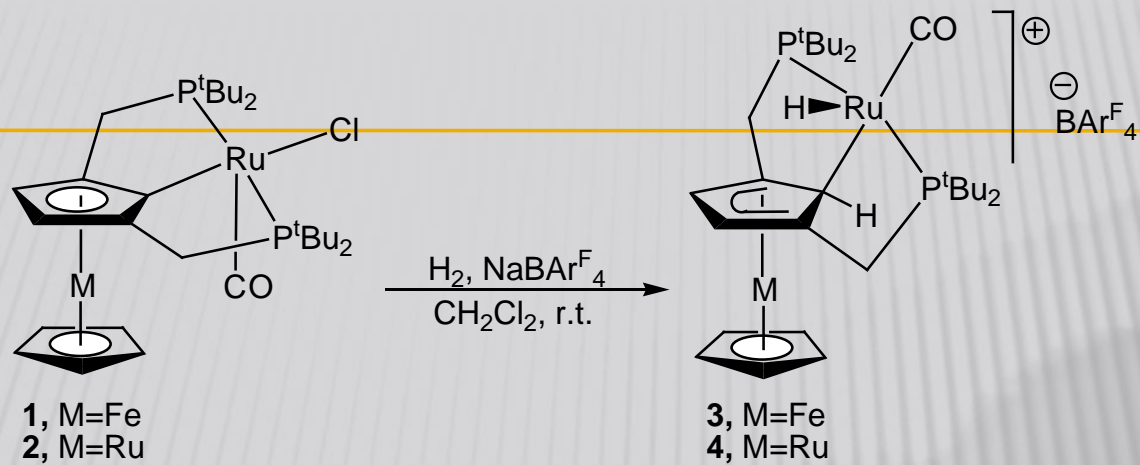
დასინთეზებულია როდიუმის და ირიდიუმის კომპლექსები ახალი, ფეროცენზე დაფუძნებული ბის(*N*-ჰეტეროციკლური კარბენული) ლიგანდით, $[\text{M}(\text{cod})\{1,2-(\text{MeNCHCHNCCH}_2)_2\text{C}_5\text{H}_3\}\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)]\text{BF}_4$ (M=Rh, Ir, cod=1,5-ციკლოოქტა-დიენი), შესაბამისი ბის(იმიდაზოლიუმის) მარილიდან. კომპლექსის სტრუქტურა დადგენილია რენტგენო-დიფრაქციული მეთოდით.

დასინთეზებულია ახალი ტიპის პინსერული ლიგანდების წინამორბედები. კომპლექსები $[\text{CpRu}(\text{CH}_3\text{CN})_3][\text{PF}_6]$, $[\text{Cp}^*\text{RuCl}]_n$ და $[\text{CpfRuCl}]_n$, რეაგირებენ 1,3-დი-ფორმილ ინდენტან უმთავრესად ახალი ტიპის ცვიტერ-იონური კომპლექსების $[\eta\text{-}6\text{-}1,3\text{-(CHO)}_2\text{C}_9\text{H}_5]\text{RuL}$ (L=C₅H₅, C₅Me₅, C₅Me₄CF₃) წარმოქმნით, მაშინ როდესაც იმავე კომპლექსების კარბანიონთან $\text{K}[1,3\text{-(CHO)}_2\text{C}_9\text{H}_5]$ რეაქციაში მიღებულია შესაბამისი რუთენოცენები.

Каталитическое дегидрирование спиртов



A. V. Polukeev, P. V. Petrovskii, A. S. Peregodov, M. G. Ezemitskaya, A. A. Koridze. Dehydrogenation of Alcohols by Bis(phosphinite) Benzene Based and Bis(phosphine) Ruthenocene Based Iridium Pincer Complexes. *Organometallics* 2013, 32, 1000-1015.



ორგანული ქიმიის მიმართულება

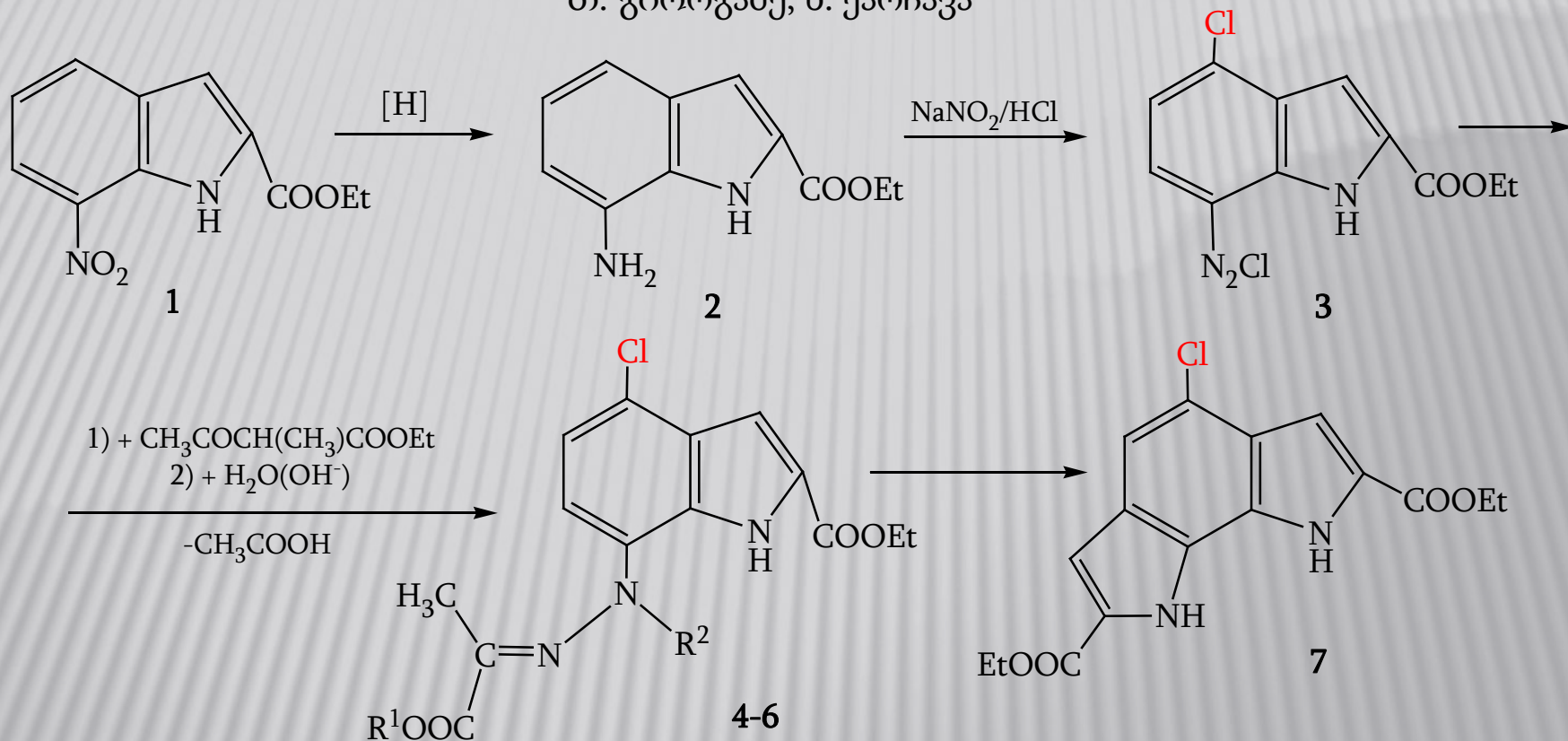
ქიმიის მეცნ. დოქტორი, სრული პროფესორი, საქართველოს
მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის აკადემიკოსი
შოთა სამსონია

ორგანული ქიმიის ინსტიტუტი

ინსტიტუტის დირექტორი შოთა სამსონია

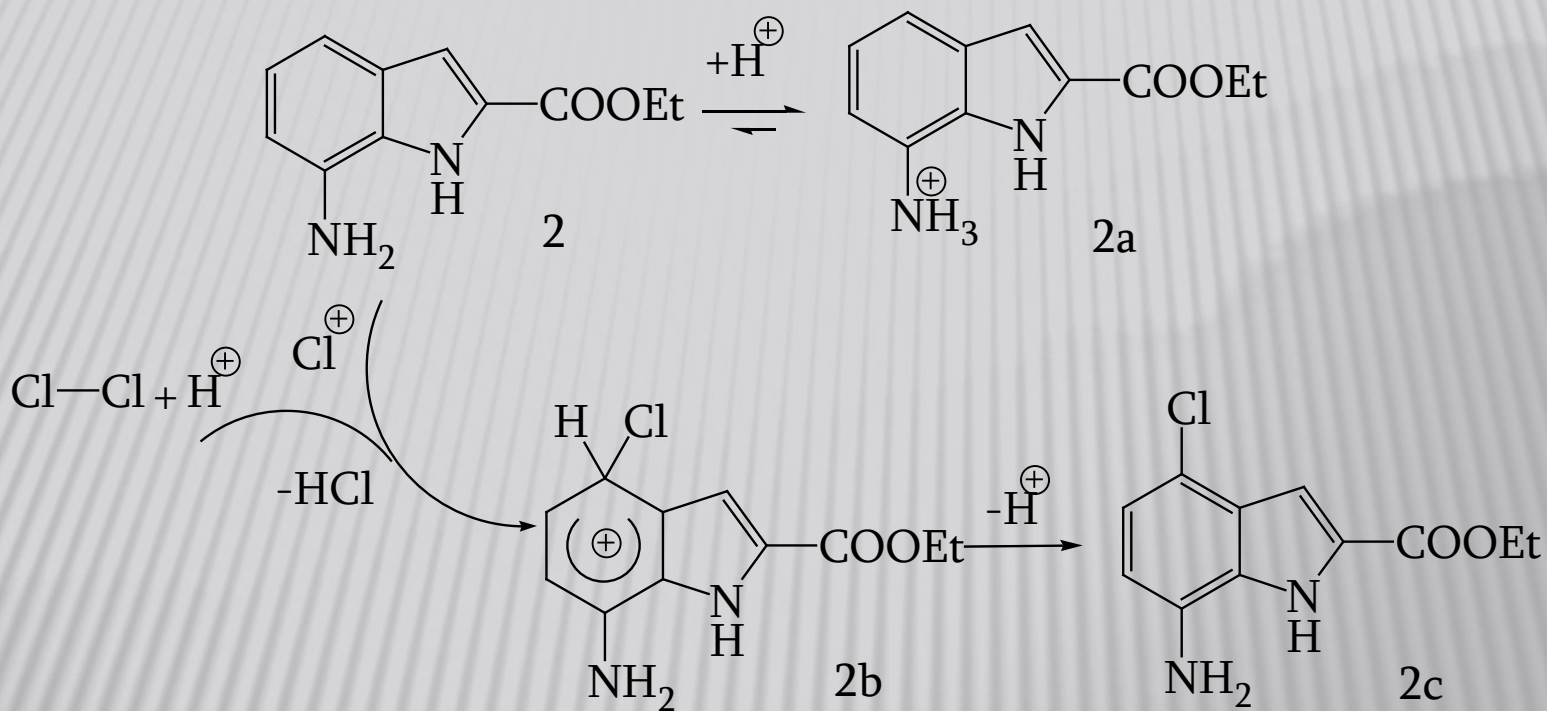
თემა 1. გამოკვლევები ინდოლის ახალი ნაწარმების სინთეზის მიზნით

ო. ჩიკვაძე, შ. სამსონია, ნ. თარგამაძე, დ. ყაჯრიშვილი, ა. კალატოზიშვილი,
თ. გიორგაძე, ნ. ქარჩავა

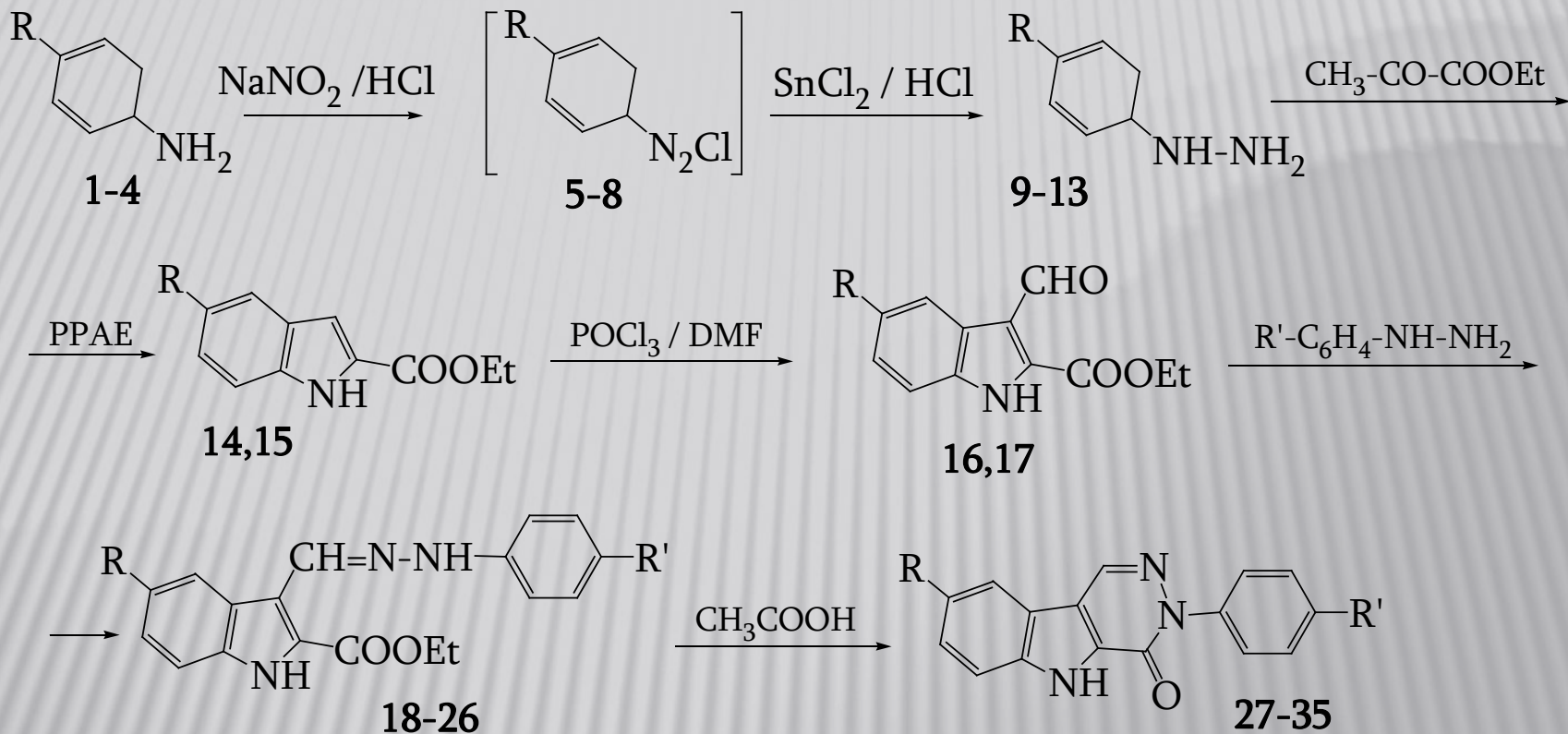


4 - $\text{R}^1=\text{Et}$, $\text{R}^2=\text{H}$; 5 - $\text{R}^1=\text{R}^2=\text{H}$; 6 - $\text{R}^1=\text{R}^2=\text{Et}$.

დადგენილ იქნა, რომ 2-ეთოქსიკარბონილ-7-ამინოინდოლის ქლორირების პროცესში მიმდინარეობს თანამდე რეაქცია, - ინდოლის ბირთვის ქლორირება, რომლის პროდუქტების შემდგომი გარდაქმნით მიიღება ქლორის ატომის შემცველი სამი ჰიდრაზონი (4-6).

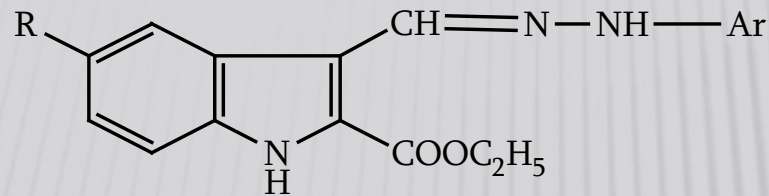


ქვანტურ-ქიმიური გათვლებების საფუძველზე მოწოდებულია ამ უჩვეულო რეაქციის სავარაუდო მექანიზმის სქემა: რეაქცია იწყება სარეაქციო არეში ახლადწარმოქმნილი ქლორონიუმის იონის (Cl⁺) ელექტროფილური შეტევით მე-2 ამინის თავისუფალი ფუძის ბენზოლის ბირთვზე და შუალედური კომპლექსის (2b) გავლით იძლევა ჩანაცვლების პროდუქტს (2c).

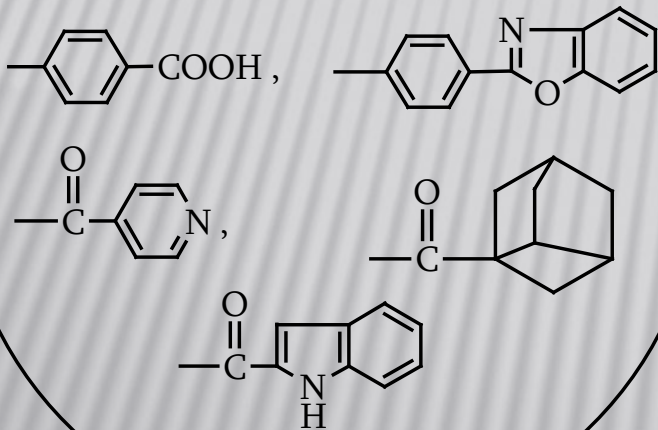


1,5,9,14,16,18⁻²²,27⁻³¹ R=Cl; 2,6,10,15,17,23⁻²⁶,32⁻³⁵ R=CH₃; 3,6,11 R=Br;
 4,7,12 R=Ph; 13 R=NO₂; 18,23,27,32 R'=Cl; 19,24,28,33 R'=Br;
 20,25, 29,34 R'=NO₂; 21,26,30,35 R'=CH₃; 22, 31 R'=Ph;

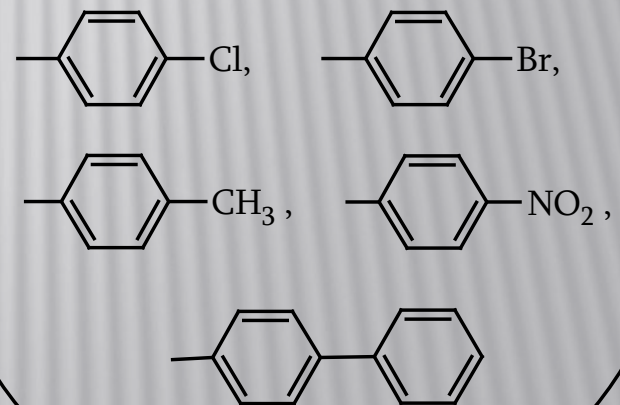
ბიომაკრომოლეკულების პოტენციური ინტერკალატორების - პირიდაზინო[4,5-b]ინდოლის ნაწარმების (27-35) ახალი ანალოგების მიღების მიზნით დასინთეზებულია 5-ჩანაცვლებული 2-ეთოქსიკარბონილ-3-ფორმილინდოლის 14 ახალი არილჰიდრაზონი.



R = CH₃, Cl, Ar =



R = Br, Ar =



თემა 2. „ფიშერის ალდეკიდების“ ბის-ანალოგების სინთეზი ვილსმაიერის რეაქციის პირობებში და დიპიროლოქინოქსალინის რიგის ტრიმეთილური ციანინის წარმოქმნა

ქ.მ.დ. მ. ტრაპაიძე, ასისტენტ-პროფესორი; ორგანული ქიმიის ინსტიტუტის კონდენსირებული ბისინდოლებისა და სპირონაერთების განყოფილების გამგე;
ქ.მ.დ. შ. სამსონია; **ქ.მ.კ. ნ. ესაკია**, უფრ. მეცნ. თანამშრომელი;
ქ.მ.კ. ე. კაცაძე, უფრ. მეცნ. თანამშრომელი, ლაბორატორიის გამგე;
ქ.მ.კ. ნ. ნიკოლეიშვილი, უფრ. მეცნ. თანამშრომელი

2-მეთილენინდოლინური ფუძეები მნიშვნელოვან შუალედურ პროდუქტებს წარმოადგენენ მრავალი ორგანული ნაერთის სინთეზისთვის. განსაკუთრებით საინტერესოა მათ საფუძველზე მიღებული მრავალრიცხოვანი საღებარები, რომლებიც გამოიყენებიან სინთეზური ბოჭკოს, ტყავის, ბამბის წარმოებაში. ასევე სენსიბილიზატორებად შუქმგრძნობიარე მასალებში, დიდი პრაქტიკული მნიშვნელობა აქვს 2-მეთილენინდოლინებიდან დასინთეზებულ ფოტო- და თერმოქრომულ მასალებს, რომლებმაც გამოიყენება ჰჰოვეს ფოტოგრაფიაში შუქფილტრების, ასლ-გადამღები მასალების დასამზადებლად, ინფორმაციის ჩაწერისა და შენახვისთვის. მათგან მიღებულია ბიოლოგიურად აქტიური ნაწარმებიც.

თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ორგანული ქიმიის მიმართულებაზე დასინთეზებულია ახალი ჰეტეროციკლური სისტემები დიპიროლონაფთალინები – იზომერული კონდენსირებული ინდოლოინდოლები და ბენზოპიროლოინდოლი. ისინი ინდოლის ბიფუნქციურ ანალოგებს წარმოადგენენ. მათ საფუძველზე მიღებულია ინდოლის ბიოლოგიურად აქტიური ნაწარმების ბიფუნქციური ანალოგები, რომელთაც უკვე გამოავლინეს სხვადასხვა სახის ბიოლოგიური აქტიურობა, ამიტომ ამ მიმართულებით კვლევების გაგრძელება აქტუალურია.

ამ მიზნით დასინთეზებული იყო აგრეთვე 2-მეთილენინდოლინის, ე.წ. „ფიშერის ფუძის“, ბის-ანალოგები იზომერული დიპიროლონაფთალინების ბაზაზე. მათი გარდაქმნის შედეგად შესაძლებელია საინტერესო თვისებების ახალი ნაერთების სინთეზი, რომელთა გამოყენება პერსპექტიულია ზემოთ ჩამოთვლილი მიმართულებებით.

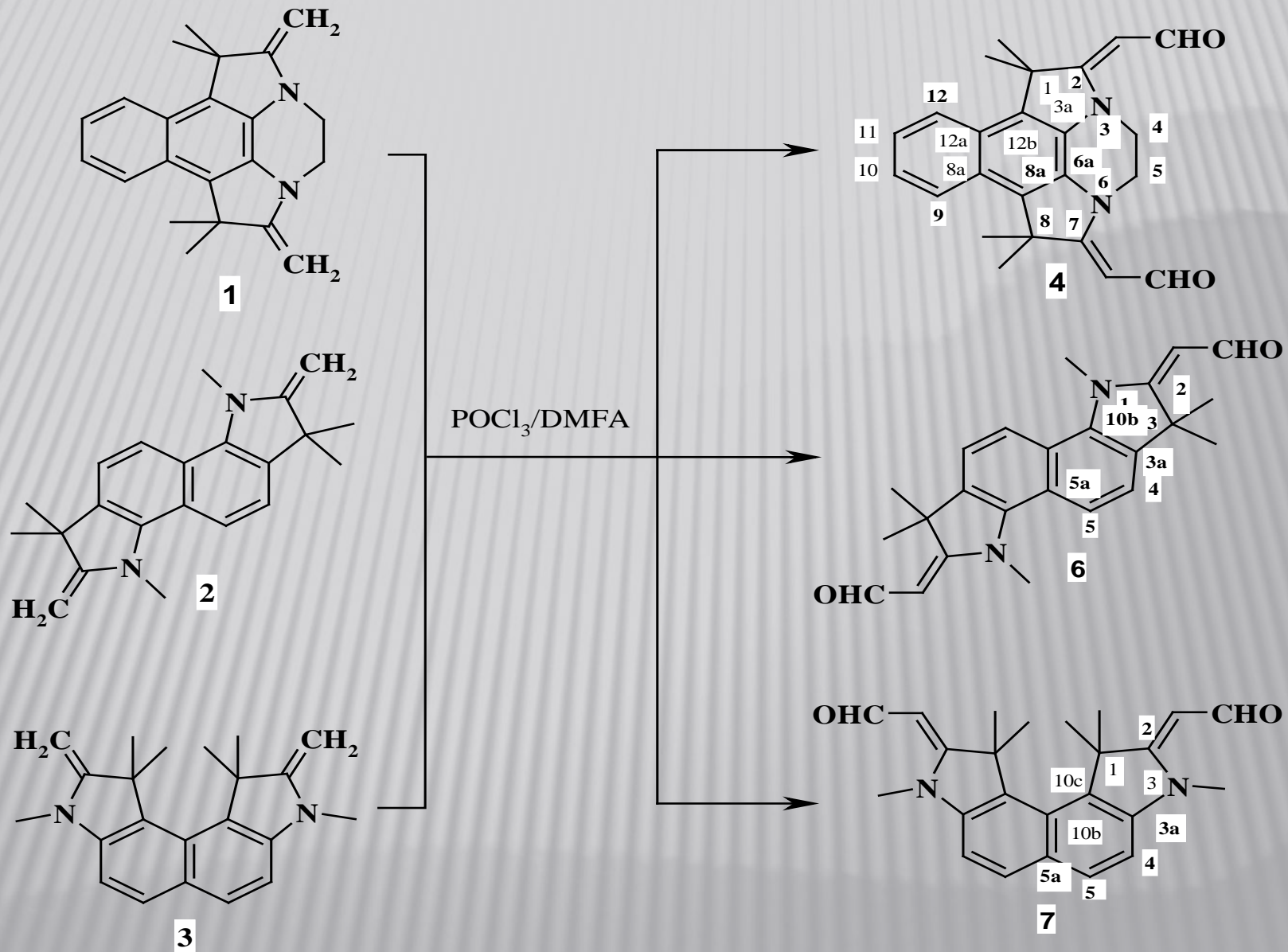
ერთ-ერთ ასეთ მიმართულებად ჩვენი ჯგუფის მიერ შერჩეულ იქნა ახალი ბის-სპიროქრომენული სისტემების სინთეზი და მათი ფოტოქრომული თვისებების შესწავლა. სპიროქრომენებს სამართლიანად უჭირავთ ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ადგილი შუქმგრძობიარე მასალებს შორის, განსაკუთრებით საინტერესოა ბის-სპიროქრომენები, სადაც ორი ქრომენული გჯუფის არსებობა ზრდის ფოტოქრომული თვისებების გაუმჯობესების შესაძლებლობას. წინა საანგარიშო პერიოდებში დასინთეზებულია ახალი ბის-სპიროპირანები იზომერული ინდოლოინდოლებისა და ბენზოდიპიროლოქინოქსალინის „ფიშერის ფუძეების“ საფუძველზე და გამოკვლეულია მათი ფოტოქრომულობა.

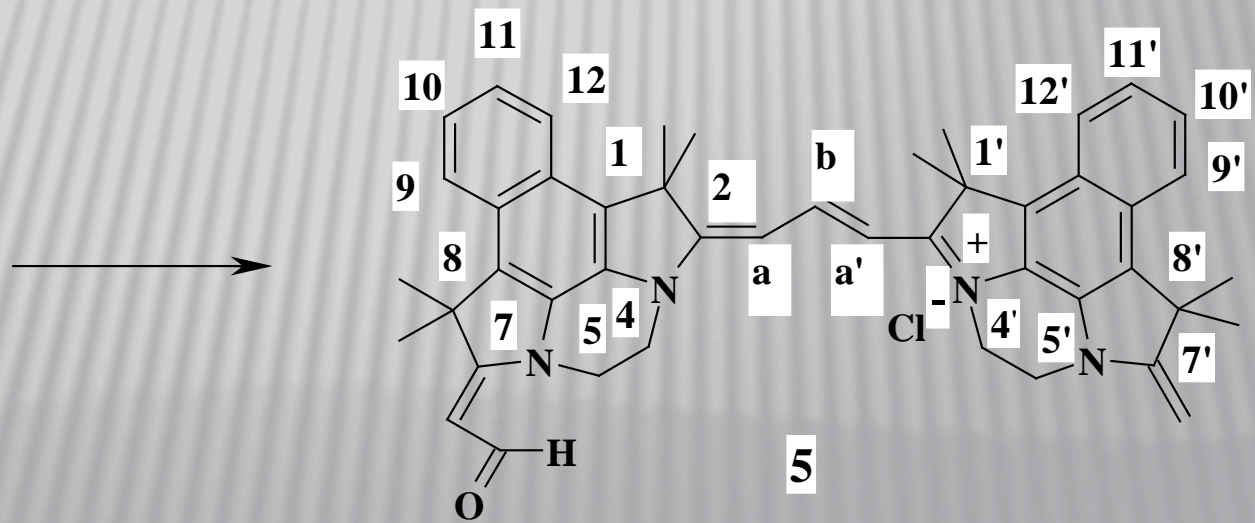
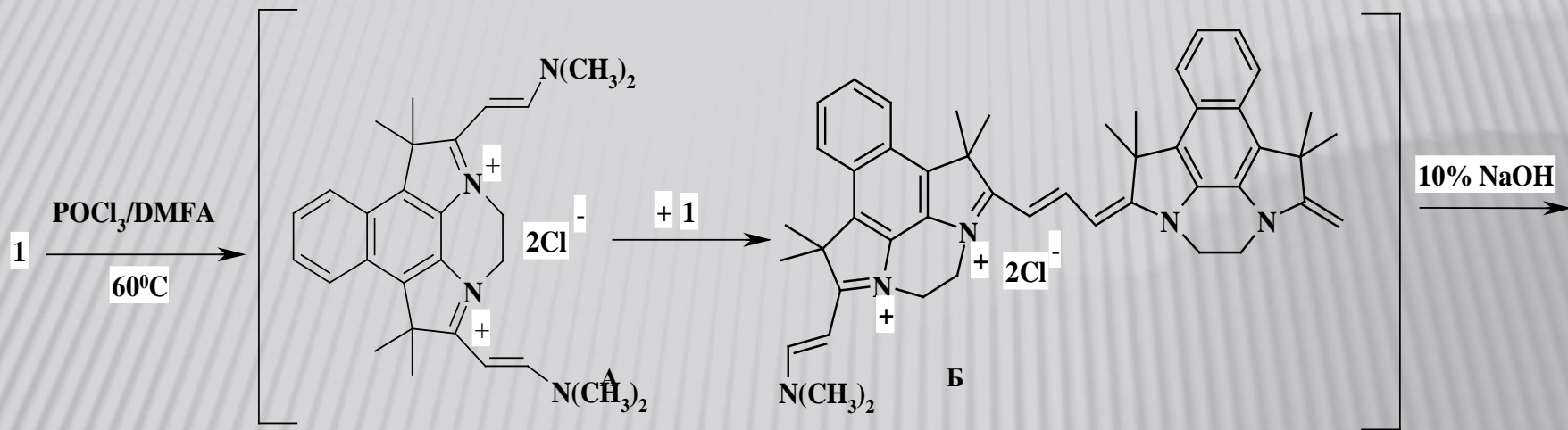
მოცემულ საანგარიშო პერიოდში წარმოდგენილია დასინთეზირული „ფიშერის ფუძის“ ბის-ანალოგების ფორმილირების რეაქციის კვლევის შედეგები.

შესწავლილია ფორმილირება ვილსმაიერის რეაქციის პირობებში სუბსტრატისა და ვილსმაიერის კომპლექსის სხვადასხვა თანაფარდობისას. იზომერული ინდოლოინდოლის რიგის „ფიშერის ფუძეების“ ფორმილირება ადვილად მიმდინარეობს შესაბამისი დიფორმილწარმოებულების: 2,7-დი(ფორმილმეთილიდენ)-1,3,3,6,8,8-ჰექსამეთილინდოლინო[7,6-გ]ინდოლინისა და 2,9-დი(ფორმილმეთილიდენ)-1,1,3,8,10,10-ჰექსამეთილინდოლინო[4,5-ე]ინდოლინის წარმოქმნით (სლაიდი 1).

საინტერესო შედეგი იქნა მიღებული 1,4,5,8-ტეტრაჰიდრო-1,1,8,8-ტეტრამეთილ-2,7-დიმეთილიდენდიპიროლო[1,2,3-d,e:3,2,1-i,j]ბენზო[გ]ქინოქსალინის ფორმილირებით 60°C-ზე, რეაგენტების მოლური თანაფარდობისას - 1:5. გამოყოფილი იქნა ანომალური პროდუქტი, სავარაუდოდ ტრიმეთინური ციანინი, მოწოდებულია მისი წარმოქმნის შესაძლო მექანიზმი (სლაიდი 2).

ხოლო დიფორმილური წარმოებული - 2,7-დი(ფორმილმეთილიდენ)-1,4,5,8-ტეტრაჰიდრო-1,1,8,8-ტეტრამეთილდიპიროლო[1,2,3-d,e:3,2,1-i,j]ბენზო[გ]ქინოქსალინი მიღებულია 35°C-ზე ვილსმაიერის კომპლექსის დიდი სიჭარბის პირობებში (1:45) 67%-იანი გამოსავლიანობით.



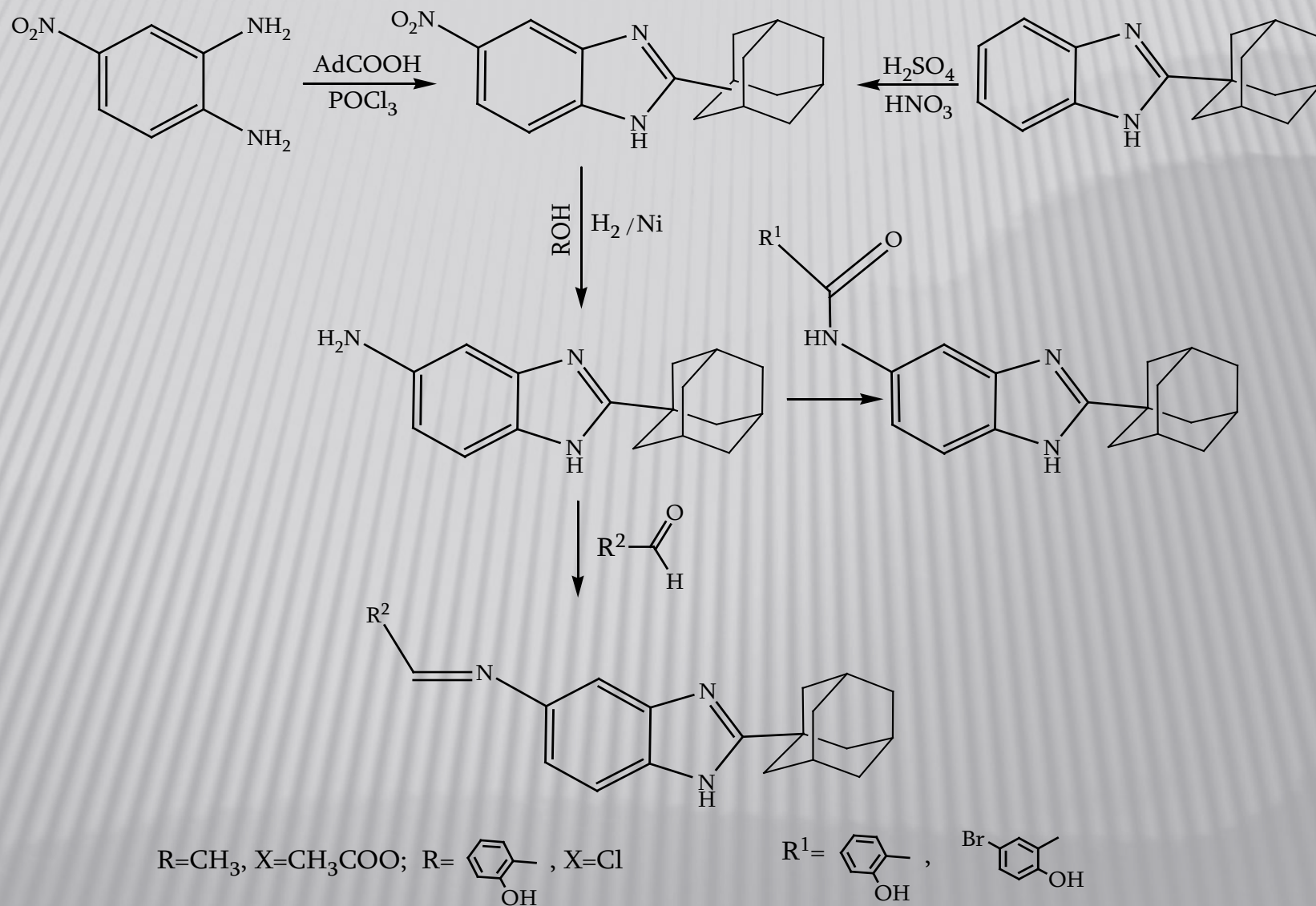


თემა 3. კვლევები ადამანტანის ფრაგმენტის შემცველი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების სინთეზის მიმართულებით

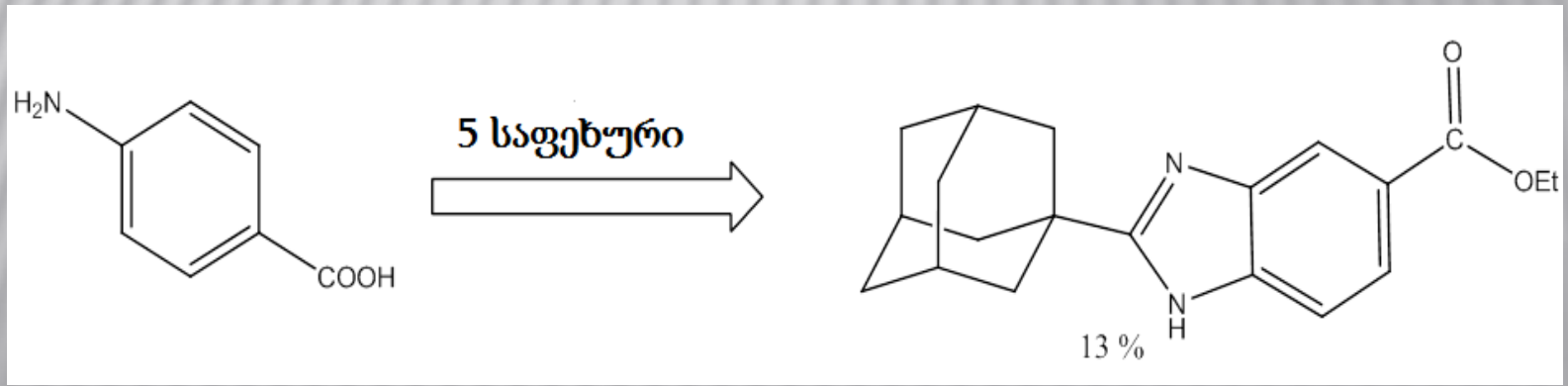
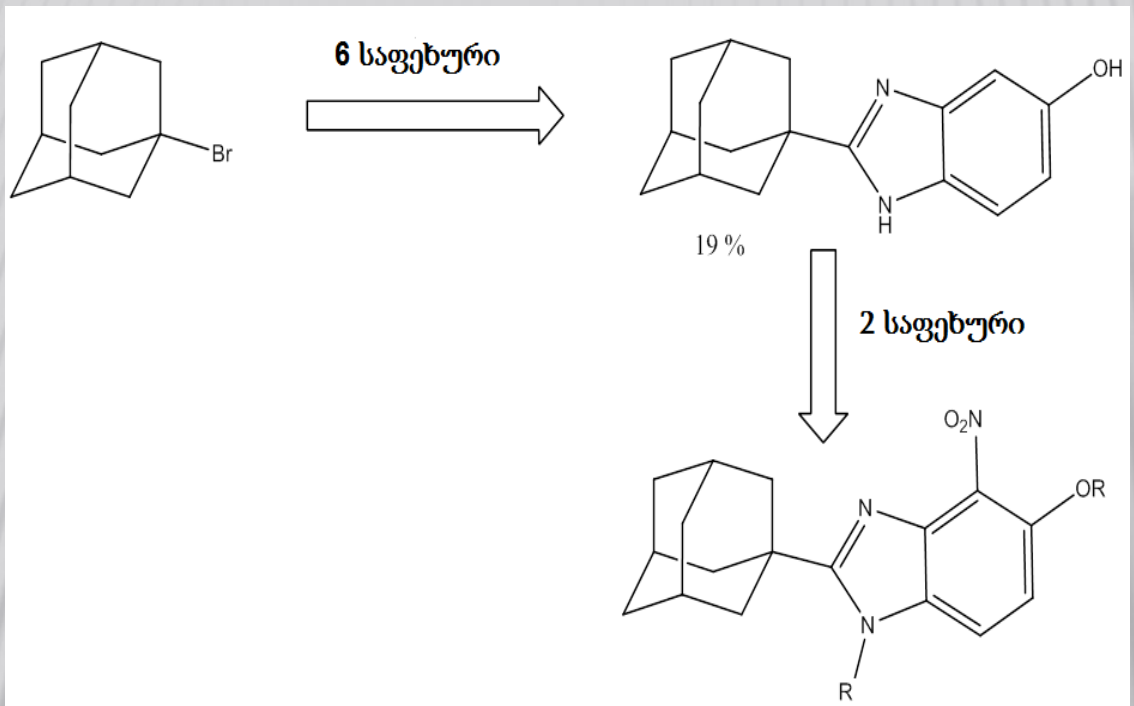
დავით ზურაბიშვილი, ორგანული ქიმიის სამეცნიერო კვლევითი ინსტიტუტის ალიციკლური ნაერთების ქიმიის განყოფილების გამგე
მედეა ლომიძე, თინათინ ბუკია, მარინა სოსელია, გიორგი ბუზალაძე, შოთა სამსონია

დამუშავებულ იქნა 5(6)-ნიტრო-2-(1-ადამანტილ)ბენზიმიდაზოლის სინთეზის მეთოდოლოგია. მიღებულია 5(6)-ამინო-2-(1-ადამანტილ)ბენზიმიდაზოლი. შესწავლილია მისი ურთიერთქმედების რეაქციები ზოგიერთ კარბონმჟავათა ნაწარმებთან და ალდეჰიდებთან. მეტა-ამინოფენოლიდან დასინთეზებულ იქნა 5(6)-ჰიდროქსი-2-(1-ადამანტილ)ბენზიმიდაზოლი. შესწავლილია მისი ნიტრირების, O- და N-ალკილირების რეაქციები. ამინობენზოის მჟავის ეთილის ეთერიდან მიღებულია 5(6)-ეთილკარბოქსი-2-(1-ადამანტილ)ბენზიმიდაზოლი. დასინთეზებულია N-(1-ადამანტილ)კარბონილ-N'-ბენზილიდენ-ო-ფენილენდიამინები. დასინთეზებული რიგი ნაერთების აგებულება დადგენილია ი.წ, უ.ი, ბმრ, მასს სპექტრისა და ელემენტური ანალიზის მონაცემებით.

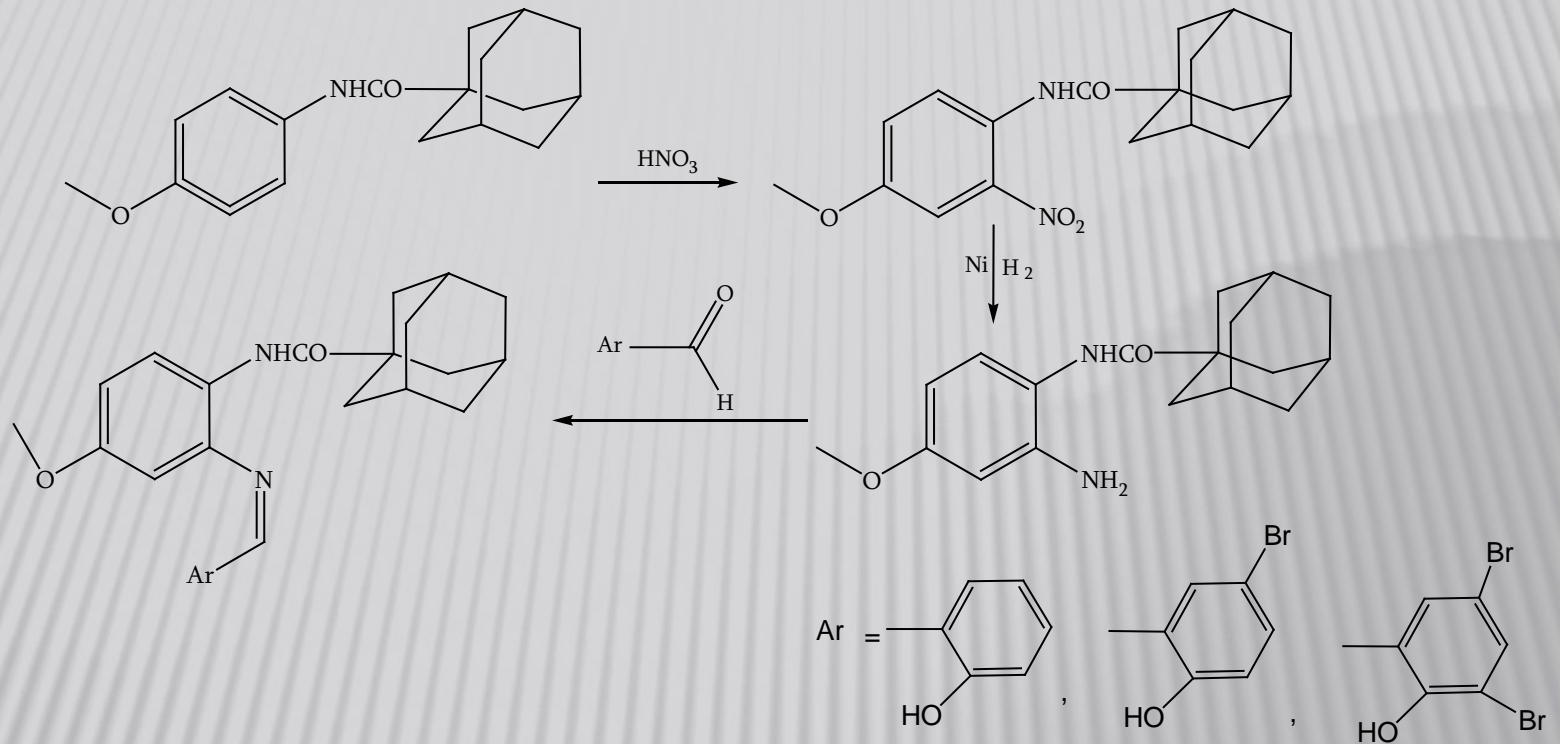
სინთეზი, აღდგენა და რეაქციები კარბონმუავათა ნაწარმებთან და ალდეჰიდებთან:



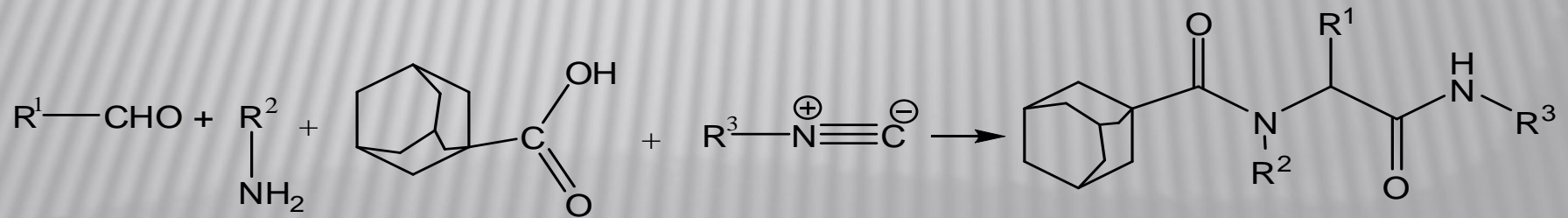
5(6)-ჰიდროქსი-2-(1-ადამანტილ)ბენზიმიდაზოლის სინთეზი. მისი ნიტრირების, O- და N-ალკილირების რეაქციები:



N-(1-ადამანტილ)კარბონილ-N'-ბენზილიდენ-ო-ფენილენდიამინების სინთეზის სქემა:



ადამანტანუმცველი დიპეპტიდების სინთეზის სქემა უგის რეაქციით:



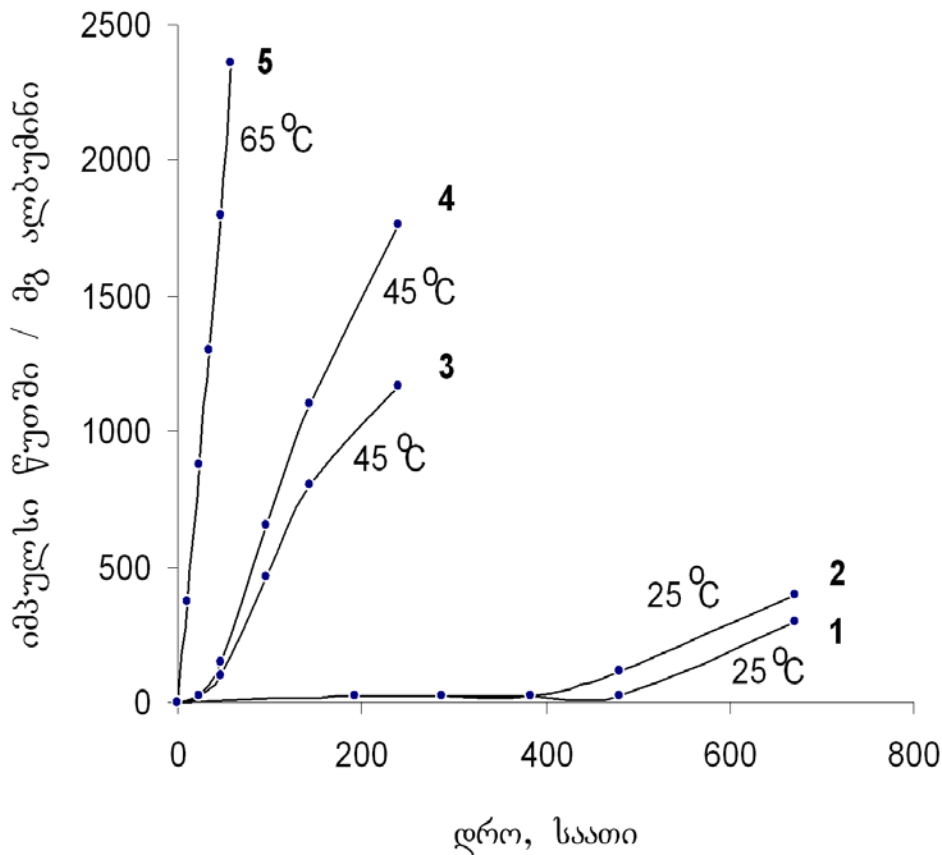
$\text{R}_1 = i\text{-C}_3\text{H}_7, \text{C}_4\text{H}_9, \text{C}_{10}\text{H}_{14}$; $\text{R}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2, \text{C}_6\text{H}_5, \text{C}_6\text{H}_5\text{-C}_2\text{H}_4, \text{Ad}, \text{C}_4\text{H}_9$; $\text{R}_3 = \text{CH}_2\text{-COOC}_2\text{H}_5, \text{C}_6\text{H}_5$.

თემა 4. ცილების N-გლიკოზილირება

ქ.მ.დ., ასისტენტ პროფესორი რ. კუბლაშვილი

- ალბუმინს დავუმატეთ 1-6 ^{14}C -D-გლუკოზა [60 მგ ალბუმინზე ავიღეთ 9,36 მგ ან 46,8 მგ გლუკოზა, რეაქციას მიმდინარეობს 30 მლ 0,06 M ფოსფატურ ბუფერში (pH 5,0; 7,0; და 8,0), სიბნელეში, 25°C, 45°C ან 65°C ტემპერატურაზე];
- დროის გარკვეულ ინტერვალებში სარეაქციო ნარევიდან აღებული ნიმუშები (5 მლ) დიალიზდებოდა დისტილირებული წყლის მიმართ სპეციალურ სადიალიზო პარკებში SERVAPOR® (აკავებს >12000 მოლეკულური მასის მქონე ცილებს);
- N-გლუკოზილირებული პროდუქტების წარმოქმნის კონტროლი ხორციელდება დიალიზებული ხსნარის 1 მლ-ის რადიოაქტიურობის განსაზღვრით. პარალელური ცდები ჩატარდა გლუკოზილირებულ ალბუმინში ალბუმინისა და არანიშანდებული D-გლუკოზის საფუძველზე ფერის წარმოქმნის ინტენსივობისა და თავისუფალი ამინოჯგუფების რაოდენობის განსაზღვრის მიზნით. N-გლუკოზილირებული ალბუმინის ჰიდროლიზატში 1-6 ^{14}C -გლუკოზის რაოდენობა განისაზღვრება ავტორადიოგრაფიით.

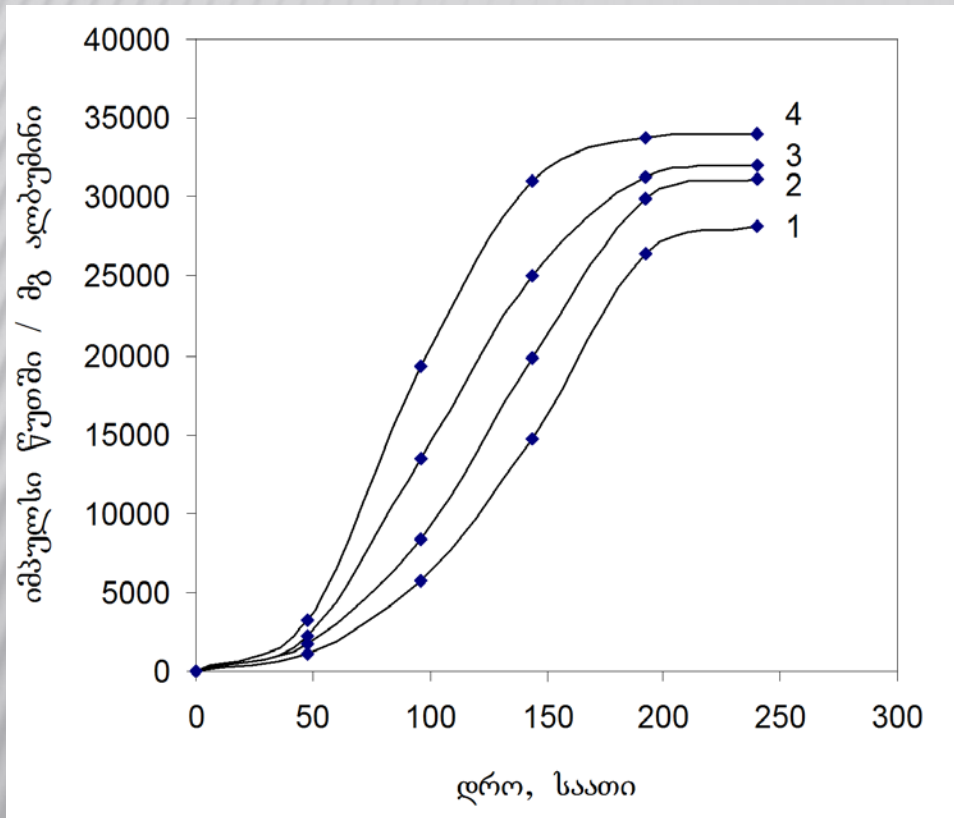
ტემპერატურისა და მორეაგირე კომპონენტების ეკვივალენტური თანაფარდობის გავლენა ალბუმინში 1-6 ¹⁴C-გლუკოზის ნახშირბადის შეუქცევად ჩართვაზე



1, 3, 5 – ეკვივალენტური თანაფარდობა
 ალბუმინი/გლუკოზა - 1 : 1

2, 4 – ეკვივალენტური თანაფარდობა
 ალბუმინი/გლუკოზა - 1 : 5

pH-ისა და მორეაგირე კომპონენტების ეკვივალენტური თანაფარდობის გავლენა ალბუმინში 1-6 ¹⁴C-გლუკოზის ნახშირბადის შეუქცევად ჩართვაზე



1 – ეკვივალენტური თანაფარდობა ალბუმინი-გლუკოზა = 1 : 1, pH 5,0;

2 – ეკვივალენტური თანაფარდობა ალბუმინი-გლუკოზა = 1 : 1, pH 7,0;

3 – ეკვივალენტური თანაფარდობა ალბუმინი-გლუკოზა = 1 : 1, pH 8,0;

4 – ეკვივალენტური თანაფარდობა ალბუმინი-გლუკოზა = 1 : 5, pH 8,0.

შებოჭილი 1-6 14C-D-გლუკოზისა და N-გლუკოზილირებული პირველადი ამინო-ჯგუფების რაოდენობა ალბუმინში

<u>გლუკოზილირებული ალბუმინის მიღების პირობები</u>				<u>ალბუმინი</u>	
<u>ალბუმინი-გლუკოზა, ეკვ. თანაფარდობა</u>	<u>H</u>	<u>T, °C</u>	<u>დრო, საათი</u>	<u>მიერთებული გლუკოზა, მგ/გ</u>	<u>გლუკოზილირებული პირველადი ამინოჯგუფები, % (შებოჭილი ¹⁴C-ის მიხედვით)</u>
1:1	7.0	25	672	1.0	0.6
1:5	77.0	225	6672	1.3	0.8
1:1	77.0	445	4480	7.3	4.7
1:5	77.0	445	4480	11.3	7.2
1:1	55.0	665	2240	94.0	60.3
1:1	77.0	665	2240	103.6	66.4
1:1	88.0	665	2240	106.6	68.3
1:5	8.0	65	240	113.3	72.6

გლუკოზის წარმოქმნა N-გლუკოზილირებული ალბუმინის ჰიდროლიზის შედეგად

<u>მაჰიდროლიზებელი აგენტი</u>	<u>ტემპერატურა, °C</u>	<u>დრო, საათი</u>	<u>გლუკოზა, %</u>
0,1 N HCl	25	24	0
0,1 N HCl	25	48	<u>კვალი</u>
0,1 N HCl	100	9	0.5
1 N HCl	100	12	2.8
1 N HCl	100	24	4.3
6 N HCl	100	24	0.7

ფიზიკური და ანალიზური ქიმიის მიმართულება

ქიმიის მეცნ. დოქტორი, სრული პროფესორი, საქართველოს
მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის აკადემიკოსი
ბეჟან ჭანკვეტაძე

ფიზიკური და ანალიზური ქიმიის ინსტიტუტი

დირექტორი ბეჟან ჭანკვეტაძე

კვლევების ძირითადი მიმართულებები:

მოლეკულათშორისი ქირალური გამოცნობის ფიზიკურ-ქიმიური
მექანიზმების კვლევა თხევად ფაზაში

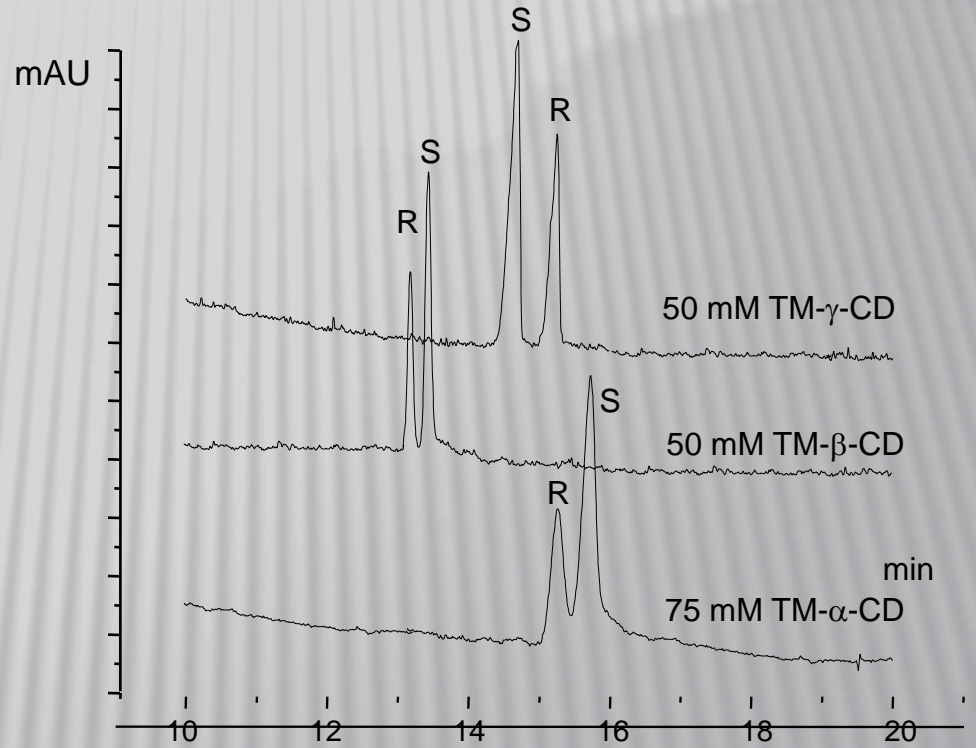
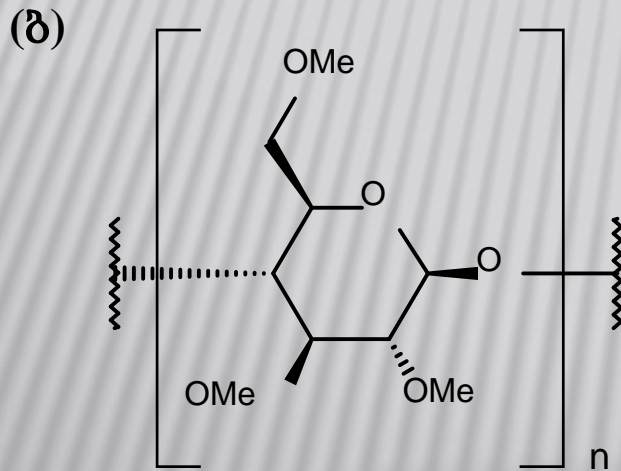
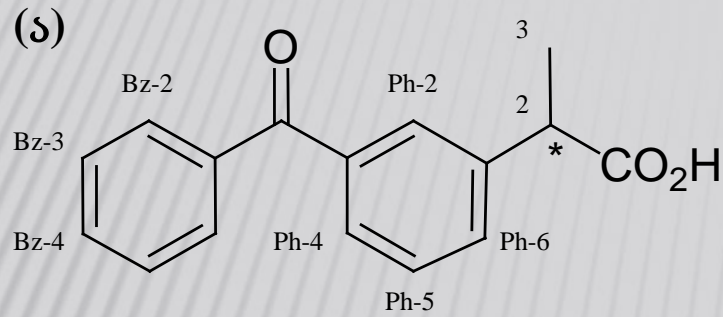
ფუნდამენტური ხასიათის კვლევები სითხურ ქრომატოგრაფიაში

ბიოსამედიცინო და ფარმაცევტული ანალიზი

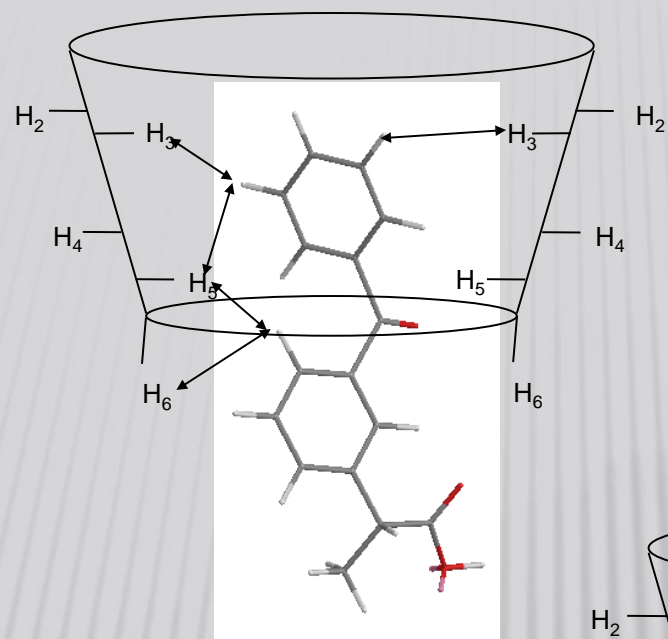
ეკოლოგია

ასიმეტრიული კატალიზი

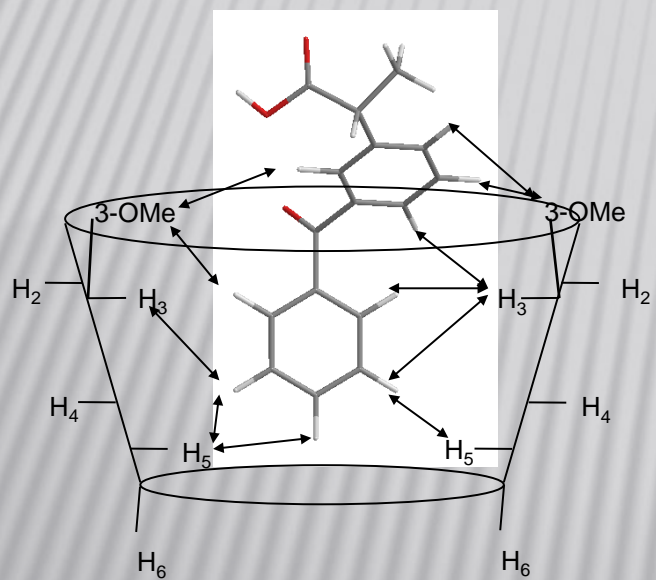
თემა 1. მოლეკულათშორისი ქირალური გამოცნობის ფიზიკურ-ქიმიური მექანიზმების კვლევა თხევად ფაზაში



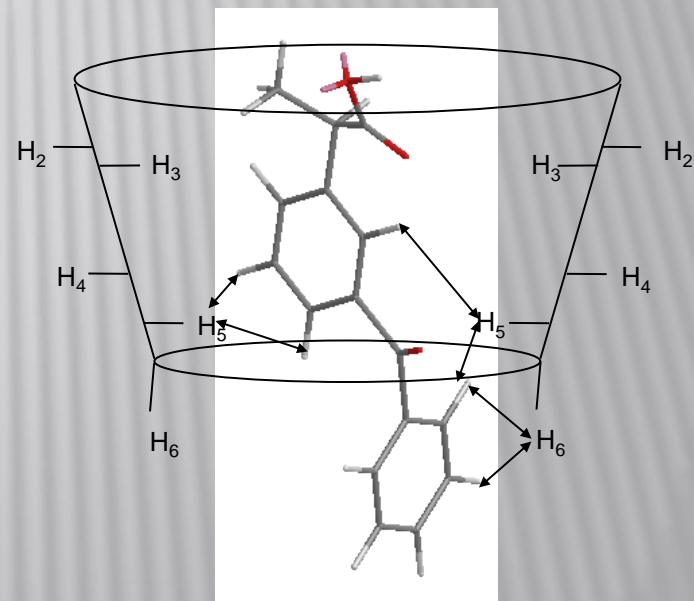
$n = 6$ TM- α -CyD; $n = 7$ TM- β -CyD; $n = 8$ TM- γ -CyD



δ



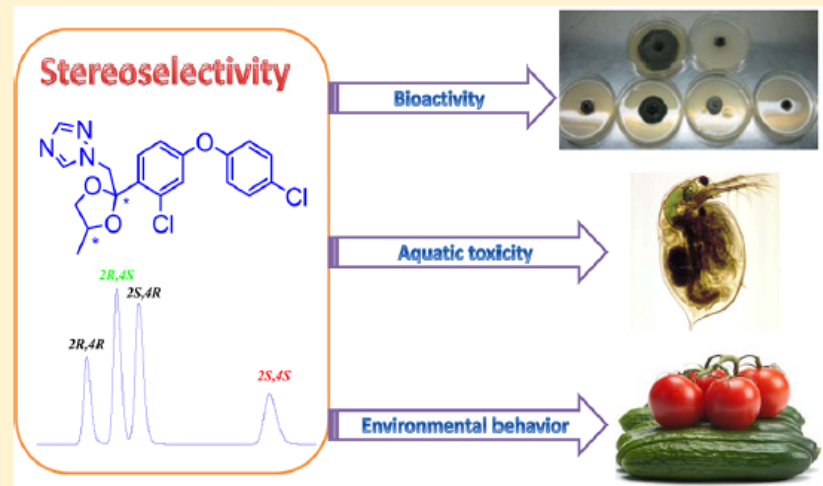
σ



δ

The chiral triazole fungicide difenoconazole: absolute stereochemistry, stereoisomer bioactivity, aquatic toxicity and environmental behavior in vegetable and soil

ABSTRACT: In this study, the systemic assessments of the stereoisomers of triazole fungicide difenoconazole are reported for the first time, including absolute stereochemistry, stereoselective bioactivity toward pathogens (*Alternaria sonali*, *Fulvia fulva*, *Botrytis cinerea*, and *Rhizoctonia solani*), and toxicity toward aquatic organisms (*Scenedesmus obliquus*, *Daphnia magna*, and *Danio rerio*). Moreover, the stereoselective degradation of difenoconazole in vegetables (cucumber, *Cucumis sativus* and tomato, *Lycopersicon esculentum*) under field conditions and in soil under laboratory-controlled conditions (aerobic and anaerobic) was investigated. There were 1.33–24.2-fold and 1.04–6.78-fold differences in bioactivity and toxicity, respectively. Investigations on the stereoselective degradation of difenoconazole in vegetables showed that the highest-toxic and lowest-bioactive (2*S*,4*S*)-stereoisomer displays a different enrichment behavior in different plant species. Under aerobic or anaerobic conditions, (2*R*,4*R*)- and (2*R*,4*S*)-difenoconazole were preferentially degraded in the soil. Moreover, difenoconazole was configurationally stable in the test soil matrices. On the basis of biological activity, ecotoxicity, and environmental behavior, it is likely that the use of pure (2*R*,4*S*)-difenoconazole instead of the commercial stereoisomer mix may help to increase the bioactivity and reduce environmental pollution.



თემა 3. ასიმეტრიული კატალიზი

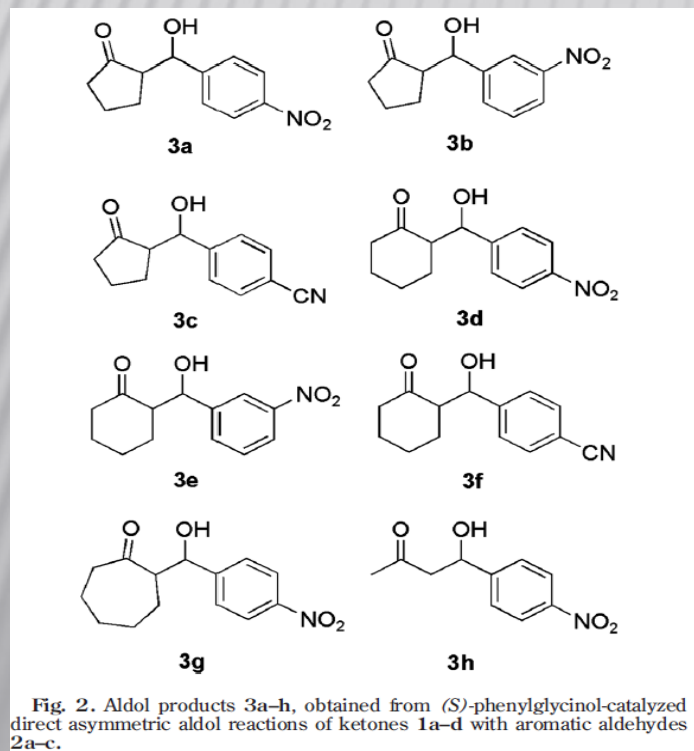
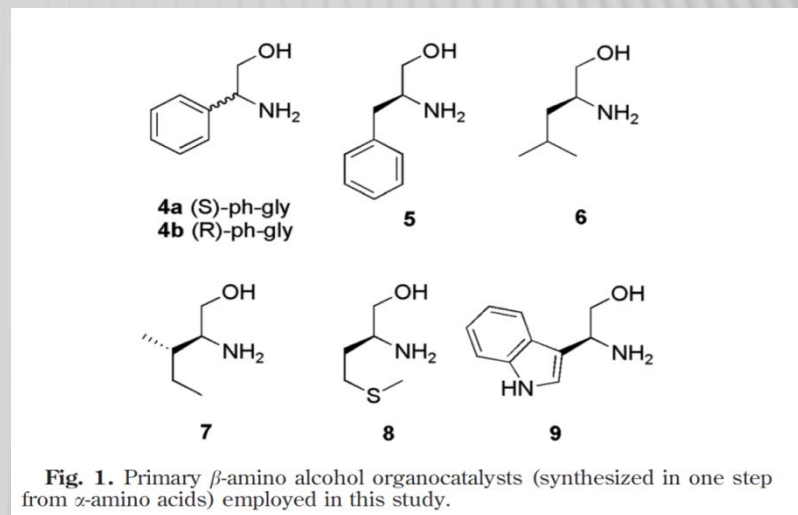
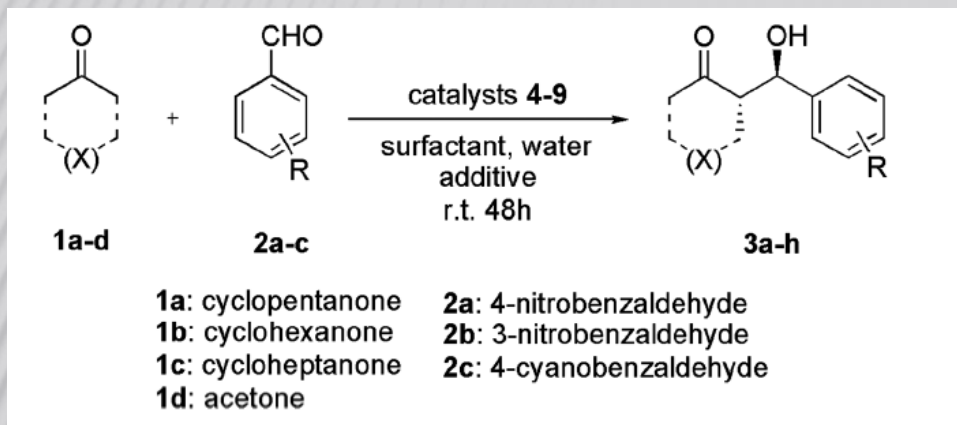


TABLE 3. (S)-Phenylglycinol-catalyzed direct asymmetric aldol reactions of ketones **1a-d** with aromatic aldehydes **2a-c** affording aldol products **3a-h** in aqueous Triton X-100 solutions^a

Entry	Ketone/ aldehyde	Product	Yield ^b [%]	syn: anti ^c [%]	ee (syn)/ ee (anti) ^c [%]
1	1a/2a	3a	58	3:97	26/47
2	1a/2b	3b	36	57:43	18/48
3	1a/2c	3c	35	30:70	8/44
4	1b/2a	3d	43	26:74	48/82
5	1b/2b	3e	41	19:81	52/89
6	1b/2c	3f	56	25:75	37/82
7	1b/2c	3f^d	37	28:72	32/41
8	1c/2a	3g	27	20:80	29/14
9	1d/2a	3h	36	–	26
10	1d/2a	3h^e	33	–	27

Abstract: Chiral β -amino alcohol-derived *N*-borane catalysts, namely noncyclic (*2S*)- and (*2R*)-2-amino-2-phenylethanol *N*-borane and their corresponding cyclic trimeric borazine derivatives, were synthesized and their catalytic activities in the asymmetric reduction of prochiral ketones were examined. Both the noncyclic and cyclic catalysts successfully catalyzed this reaction, giving the desired secondary alcohols in up to 82% isolated yield and with up to 80% enantioselectivity. The noncyclic catalyst was stable in aqueous and organic solvents, whereas the polycyclic borazine was stable only in nonprotic dry organic solvents.

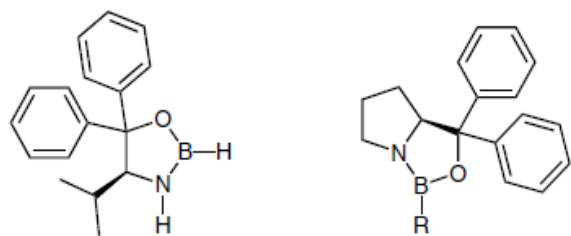


Figure 1 Chiral oxazaborolidine catalysts developed by Itsuno (left) and Corey (right) for the asymmetric reduction of prochiral ketones

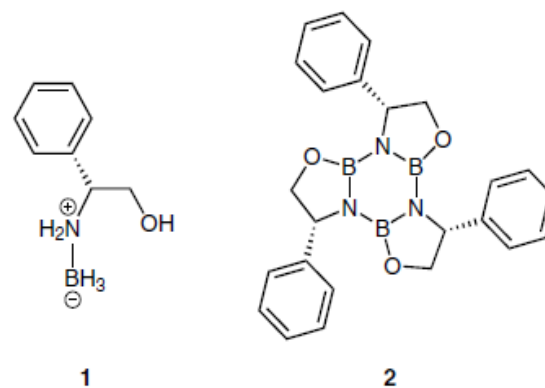
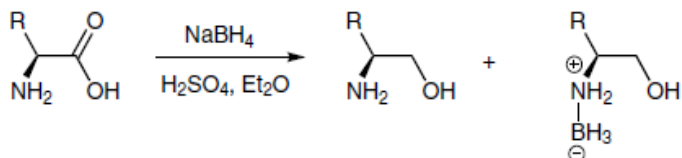


Figure 2 (*2R*)-2-amino-2-phenylethanol *N*-borane catalyst (1) and the corresponding polycyclic borazine catalyst 2

შებრუნებულ მიცელებში ჩაჭერილი წყლის სტრუქტურული ცვლილებების შესწავლა

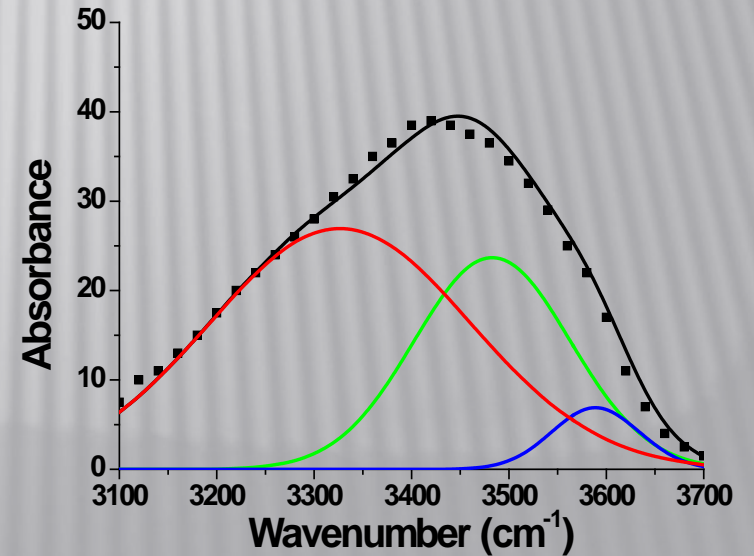
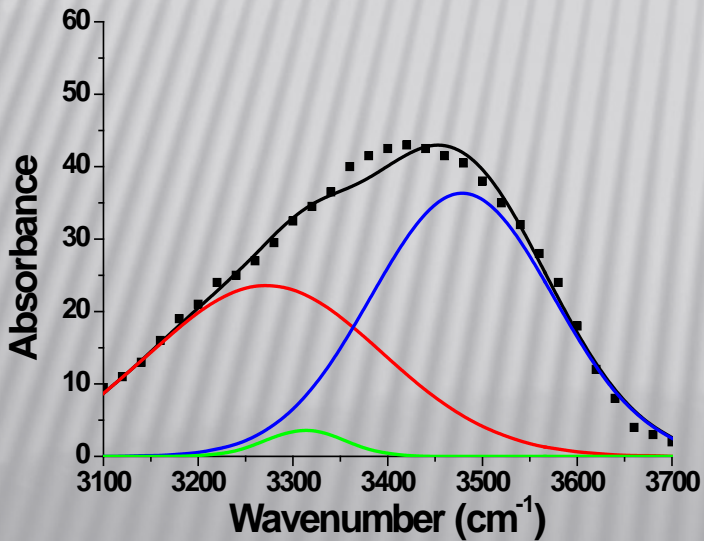
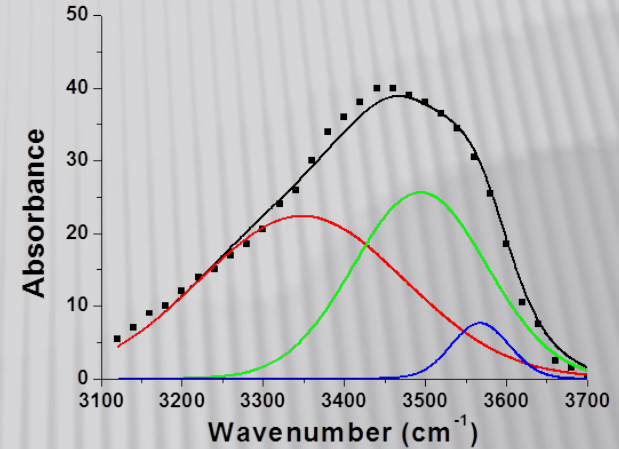
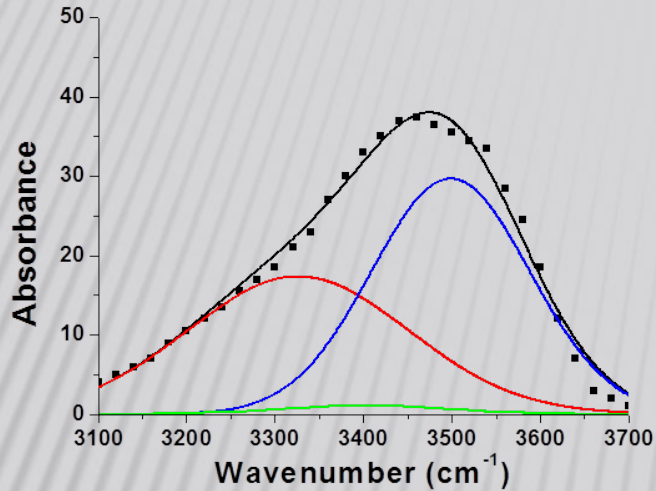
მარინა რუხაძე

ქიმიის მეცნ. დოქტორი, ასოცირებული პროფესორი

კვლევის ძირითადი მიზნები:

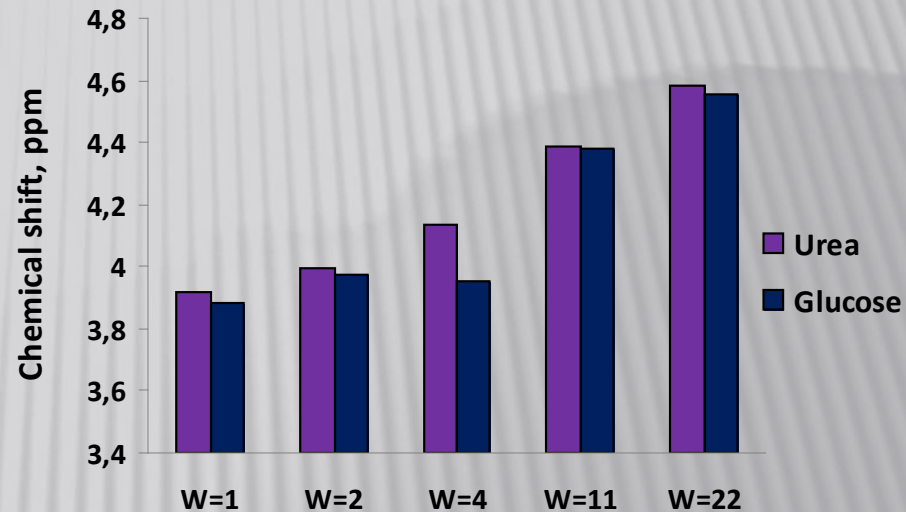
შებრუნებული მიკროემულსიის მიკროგარემოს კვლევა მოლეკულური სინჯების გამოყენებით ულტრაიისფერი-ხილული, ინფრაწითელი, პროტონულ მაგნიტური რეზონანსული სპექტროსკოპიული და შებრუნებული მიცელური ქრომატოგრაფიული მეთოდებით.

თავისუფალი, ბმული და ჩაჭერილი წყლის თანაფარდობა კოსმოტროპული და ქაოტროპული დანამატების თანაობისას შებრუნებული მიცელის გულში



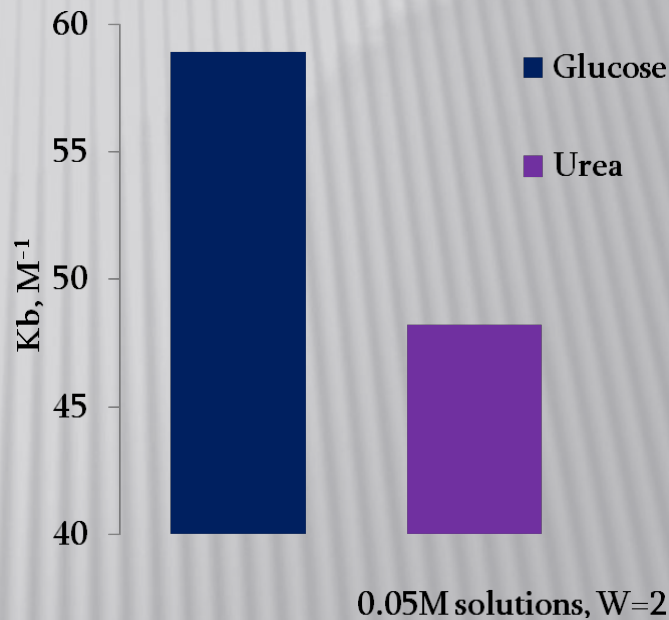
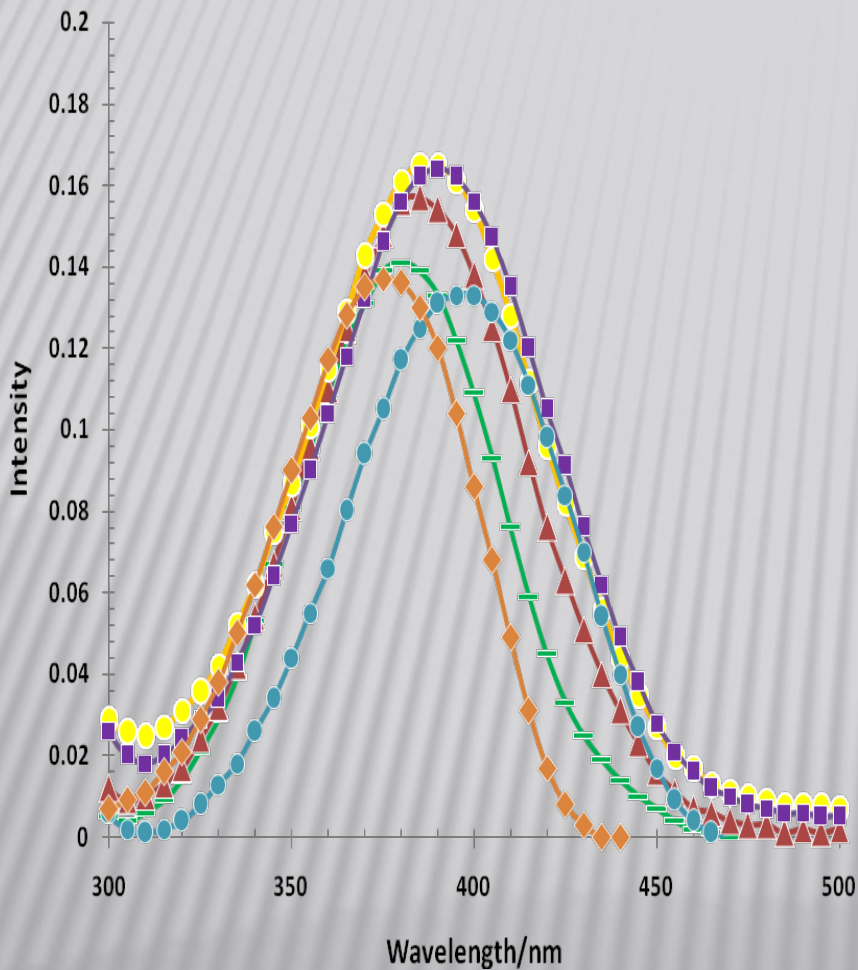
შებრუნებული მიკროემულსიის წყლის გულის სტრუქტურული ცვლილებების წყლის შემცველობაზე დამოკიდებულების კვლევა ინფრაწითელი სპექტროსკოპიის გამოყენებით $3000-3800\text{cm}^{-1}$ უბანში სტრუქტურის მომაწესრიგებელი და სტრუქტურის დამრღვევი არაიონური დანამატების თანაობისას წყლის გულში მიანიშნებს, რომ შარდოვანა ხელს უწყობს, ხოლო გლუკოზა თრგუნავს თავისუფალი წყლის ფრაქციის ზრდას შებრუნებული მიცელის წყლის ჯიბეებში.

ქიმიური წანაცვლების მნიშვნელობები W-ს სხვადასხვა მნიშვნელობებზე



პროტონულ-მაგნიტურ რეზონანსულმა გამოკვლევებმა აჩვენა, რომ ქიმიური წანაცვლებების მნიშვნელობები ქაოტროპული შარდოვანას თანაობისას აჭარბებს მათ მნიშვნელობებს კოსმოტროპული გლუკოზის დანამატების შემთხვევაში.

ორთო-ნიტროანილინის AOT-ის შებრუნებულ მიცელასთან შეკავშირების მუდმივების მნიშვნელობები მაღალია გლუკოზის თანაობისას შარდოვანას დანამატთან შედარებით



დასკვნები:

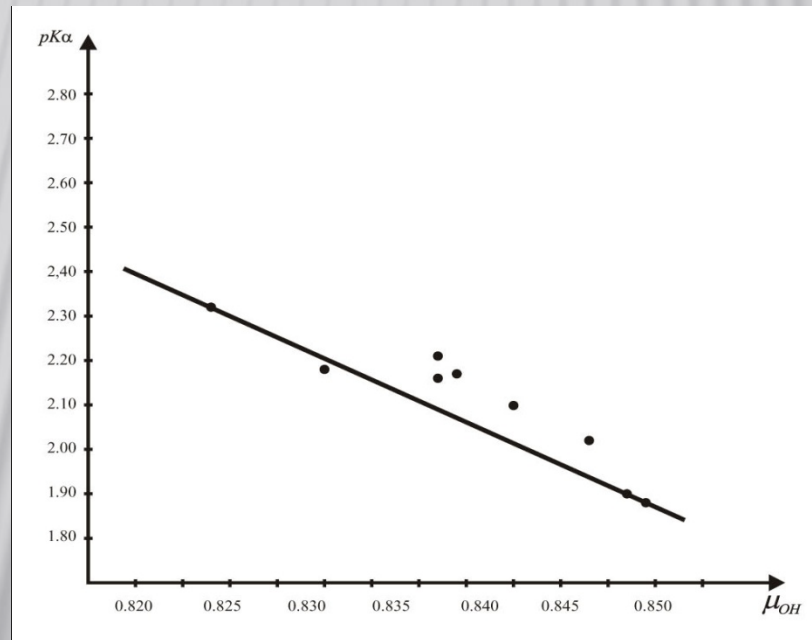
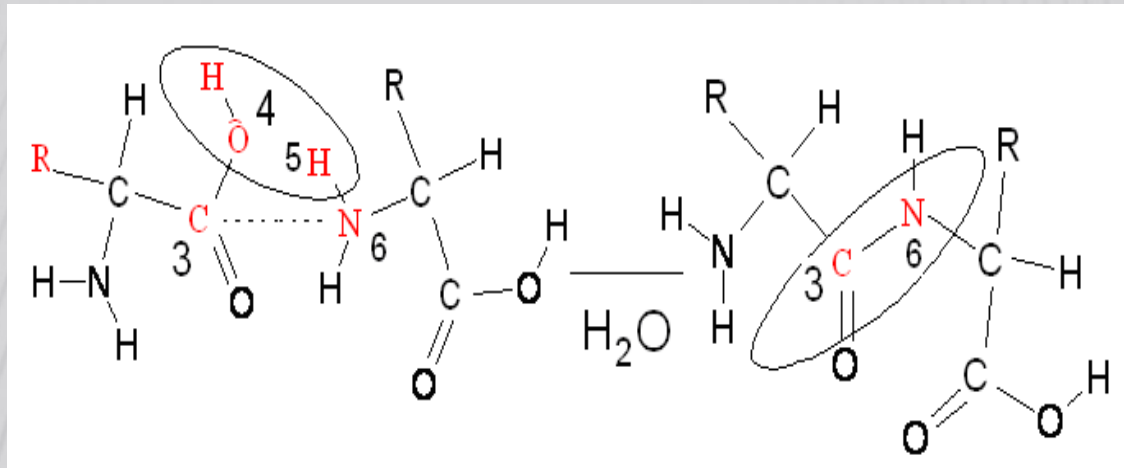
- ✘ ნატრიუმის ბის (2-ეთილჰექსილ) სულფოსუქცინატის (AOT)-ის შებრუნებული მიცელების მიკროგარემო გამოკვლეულია ინფრაწითელი, პროტონულ მაგნიტური რეზონანსული და ულტრაიისფერი-ხილული სპექტროსკოპიული მეთოდებით, აგრეთვე წყალი-ზეთში მიკროემულსიური ქრომატოგრაფიის მეთოდით წყლის ჯიბეებში სტრუქტურის მომაწესრიგებელი და სტრუქტურის დამრღვევი არაიონური დანამატების თანაობისას.
- ✘ მიღებული შედეგები მნიშვნელოვანია ნანომეტრის ზომის ღრმულებში ჩაჭერილი წყლის სტრუქტურის კვლევის სფეროში.
- ✘ კოსმოტროპული და ქაოტროპული არაიონური დანამატების გავლენის შესწავლამ ულტრაიისფერ-ხილული სპექტროსკოპიის მეთოდით აჩვენა მოლეკულური სინჯის ორთო-ნიტროანილინის (o-NA) შებრუნებულ მიცელებთან შეკავშირების კონსტანტებზე მათი განსხვავებული გავლენა, კერძოდ შეკავშირების მუდმივები მაღალია გლუკოზის თანაობისას შარდოვანასთან შედარებით.

ამინომჟავების თვისებების ქვანტურ-ქიმიური დახასიათება

ემერიტუს პროფესორი ჯუმბერ კერესელიძე

მარინე ქვარაია, გიორგი მიკუჩაძე

ცნობილია, რომ ამინომჟავების გენოტიპი (თანმიმდევრობა), კოდირებულია დნმ-ის ნუკლეოტიდური ფუძეებით, მაგრამ ცილაში ამინომჟავების თანმიმდევრობის მექანიზმი ნაკლებად არის შესწავლილი. ამასთან დაკავშირებით შესაძლებელია შეიქმნას ამ თანმიმდევრობის მოდელები, რომლებშიც პეპტიდური ბმების წარმოქმნის ალბათობების შეფასებისთვის გამოყენებულ იქნება შესაბამისი ამინომჟავების ენერგეტიკული და ელექტრონული მახასიათებლები. აღნიშნული სიდიდეები გამოთვლილია ქვანტური ქიმიის თანამედროვე მეთოდის - სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (DFT – Density Functional Theory) გამოყენებით. მეორეს მხრივ, ამინომჟავების თანმიმდევრობის კომბინაციების რიცხვი უსასრულოდ დიდია. ამის გამო დაწყებულია მხოლოდ გლიცინის სხვა ამინომჟავებთან შერჩეული წყვილების მიერ პეპტიდური ბმების წარმოქმნის ალბათობების კრიტერიუმების კვლევა. ეს კრიტერიუმები შეიცავენ პეპტიდური ბმების წარმოქმნის აქტივაციის ენერგიას (ΔE^\ddagger), რეაქციის ენერგიას (ΔE), ელექტრონული მუხტის სიდიდეებს კარბონილის ნახშირბადის (q_C) და ამინის ჯგუფის აზოტის ატომებზე (q_N) და წყლის მოლეკულის გამოყოფაში მონაწილე (PC-O, PO-H, PN-H) და პეპტიდის წარმოქმნამდე CN (PN-C) ბმის რიგის სიდიდეებს. ამ სიდიდეების ანალიზის შედეგად დადგინდა, რომ პეპტიდური ბმის ყველაზე დიდი ალბათობა დამახასიათებელია გლიცინ-ვალინის წყვილისთვის. შემოთავაზებული მიდგომა გამოყენებული იქნება სხვა წყვილებისა და უფრო რთული კომბინაციებისთვის.



სურათი. ზოგიერთი ამინო მჟავას მჟავიანობის (pKa) ჰიდროქსილის ჯგუფის დიპოლური მიმენტისგან დამოკიდებულება

ცხრილი 1. დიპოლური მომენტის (μ), იონიზაციის პოტენციალის (I), კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომზე ($q_{C=O}$) და ამინის ჯგუფის აზოტის ატომზე (q_N) მუხტის სიდიდის, კარბონილის ჯგუფის ბმის რიგის ($P_{C=O}$) და ჰიდროქსილის ჯგუფის დიპოლური მომენტის (μ_{OH}) მნიშვნელობები

амино кислота	R-группа	μ, D	I, eV	$q_{(=O)}$	$q(N)$	$P_{C=O}$	μ_{OH}, D	$pK_{\beta_{NH_2}}$	$pK_{\alpha_{COOH}}$	$\Delta H^* \text{ cal/kmol}$
1. Глицин	H	2.01	-0.208	-0.246	-0.230	1.81	0.841	9.8	2.34	0.94
2. Аланин	CH ₃	2.03	-0.207	-0.245	-0.225	1.80	0.841	9.9	2.34	0.58
3. Валин	CH(CH ₃) ₂	1.35	-0.214	-0.253	-0.216	1.82	0.824	9.7	2.32	0.17
4. Лейцин	CH ₂ CH(CH ₃) ₂	2.29	-0.200	-0.239	-0.232	1.74	0.843	9.7	2.36	0.36
5. Изолейцин	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	1.95	-0.205	-0.242	-0.220	1.78	0.843	9.8	2.36	0.02
6. Серин	CH ₂ OH	2.49	-0.208	-0.262	-0.227	1.80	0.836	9.2	2.21	0.32
7. Треонин	CH(OH)CH ₃	2.14	-0.217	-0.254	-0.213	1.80	0.831	9.1	2.71	0.37
8. Цистеин	CH ₂ SH	1.40	-0.186	-0.257	-0.212	1.82	0.840	9.3	2.10	-
9. Метионин	(CH ₂) ₂ SCH ₃	1.86	-0.211	-0.252	-0.223	1.87	0.846	10.8	1.90	-
10. Аспарагин. к-та	CH ₂ COOH	4.35	-0.220	-0.250	-0.232	1.87	0.847	9.9	1.88	0.80
11. Аспарагин	CH ₂ C=ONH ₂	2.11	-0.223	-0.255	-0.208	1.83	0.844	9.5	2.02	0.74
12. Глутамин. к-та	(CH ₂) ₂ COOH	5.24	-0.199	-0.245	-0.231	1.81	0.836	8.8	2.16	0.17
13. Глутамин	(CH ₂) ₂ CONH ₂	2.92	-0.211	-0.237	-0.221	1.82	0.837	9.1	2.17	0.67
14. Аргинин	(CH ₂) ₃ NH-NH ₂ =NH	2.64	-0.197	-0.258	-0.211	1.83	0.834	9.0	2.17	0.98
15. Лизин	(CH ₂) ₄ NH ₂	0.81	-0.198	-0.259	-0.212	1.83	0.830	9.2	2.18	0.03

ცხრილი 2. ამინომჟავების წყვილებს შორის პეპტიდური ბმის წარმოქმნის ენერგეტიკული და ელექტრონული მახასიათებლები

N	ამინო მჟავები	R-ჯგუფი	ΔE^\ddagger , კჯ/ მოლ	ΔE , კჯ/ მოლ	q_C (3)	q_N (7)	P_{C-O}	P_{O-H}	P_{N-H}	P_{C-N}	Δq_{3-7}
1	გლი-გლი	H	44.1	3.5	+0.167	- 0.124	0.97	0.10	0.79	0.37	0.43
2	გლი-ალა	CH ₃	36.1	-2.0	+0.162	- 0.110	0.90	0.14	0.75	0.44	0.52
3	გლი-სერ	CH ₂ OH	45.9	10.5	+0.167	- 0.122	0.96	0.14	0.79	0.34	0.45
4	გლი-ტრეო	CH ₃ CHOH	49.3	14.8	+0.169	- 0.123	0.96	0.10	0.79	0.36	0.46
5	გლი-მეთ	CH ₃ S (CH ₂) ₂	19.2	-15.9	+0.169	- 0.127	0.97	0.10	0.78	0.36	0.42
6	გლი-ცისტ	CH ₂ SH	55.6	1.4	+0.169	- 0.127	0.97	0.10	0.78	0.36	0.42
7	გლი-ვალ	CH (CH ₃) ₂	9.9	-1.6	+0.156	- 0.095	0.83	0.15	0.72	0.49	0.61
8	გლი-ლიზ	(CH ₂) ₄ NH ₂	40.5	-0.3	+0.169	- 0.127	0.95	0.09	0.85	0.39	0.42
9	გლი-ასპმე	CH ₂ COOH	46.3	10.7	+0.169	- 0.126	0.91	0.14	0.76	0.39	0.39

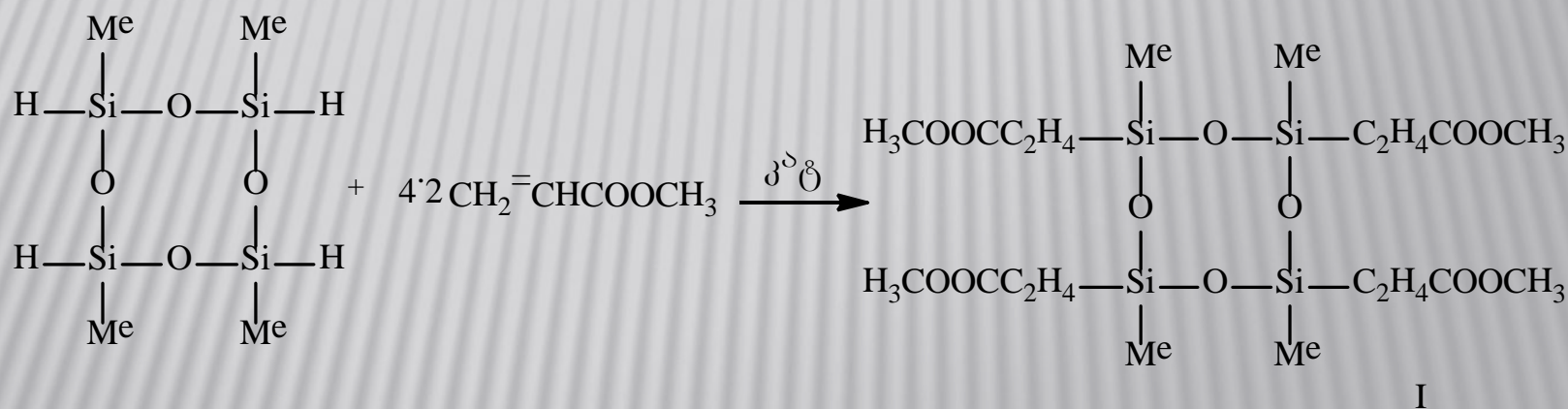
მაკრომოლეკულების ქიმიის მიმართულება

ქიმიის მეცნ.დოქტორი, სრული პროფესორი
ომარ მუკბანიანი

მაკრომოლეკულების ქიმიისა და პოლიმერული
კომპოზიციების ს/კ ინსტიტუტი

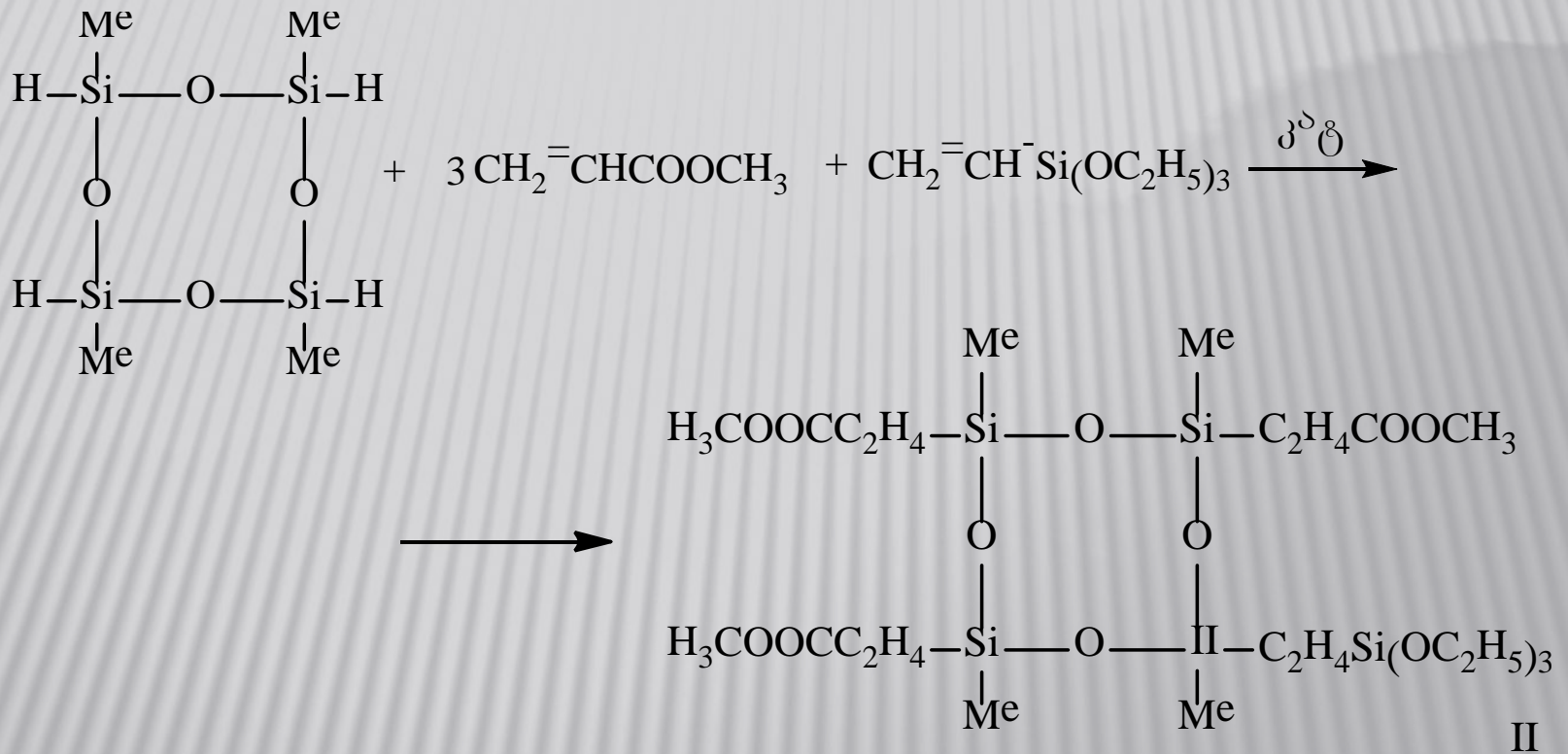
დირექტორი ომარ მუკბანიანი

შესწავლილია ცის- და ტრანს-იზომერული ნარევის 2,4,6,8-ტეტრაჰიდრო-2,4,6,8-ტეტრამეთილციკლოტეტრასილოქსანის (D_4^H) ჰიდრიდული მიერთების რეაქცია აკრილის მჟავას მეთილის ეთერთან, მორეაგირე კომპონენტების 1:4.2 თანაფარდობით პლატინის ოჯახის კატალიზატორების თანაობით 50%-იან განზ. ტოლუოლის ხსნარში 60-70°C. დადგენილ იქნა, რომ ჰიდროსილილირება მიმდინარეობს ძალიან ნელა როგორც პლატინაქლორწყალბადმჟავას კატალიზატორზე, ასევე კარს-ტედის კატალიზატორზე, ამიტომ ნახშირზე დაფენილი პლატინის კატალიზატორი ჰიდროსილილირების რეაქციებში არ გამოგვიყენებია.



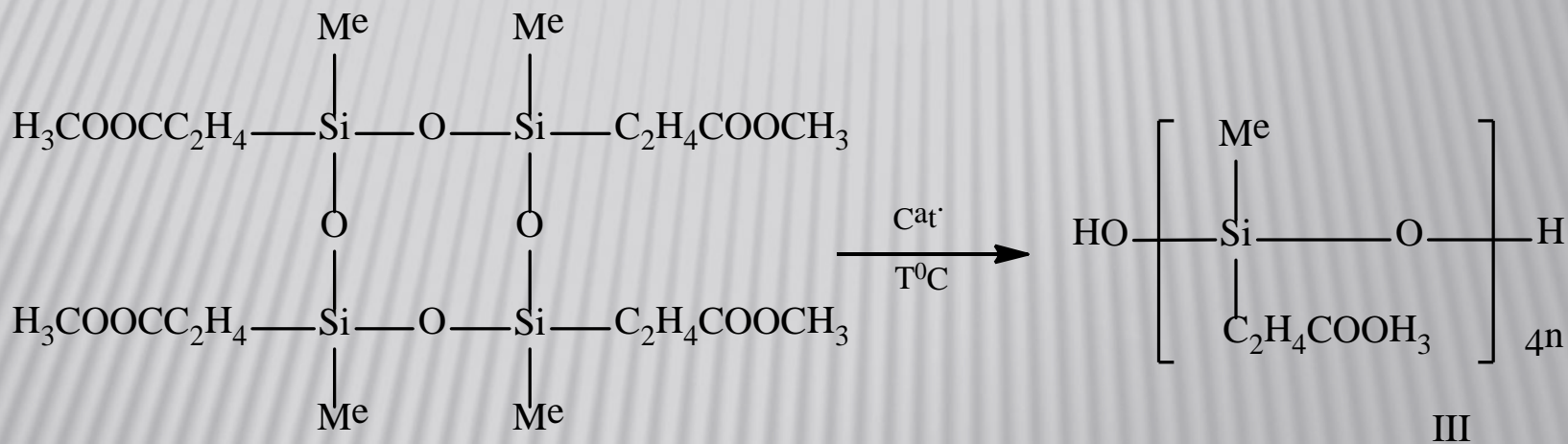
სქემა 1. D_4^H -ის ჰიდრიდული მიერთება აკრილის მჟავას მეთილის ეთერთან

შესწავლილია D_4^H ჰიდროსილილების რეაქციები აკრილის მჟავას მეთილის ეთერთან და ვინილტრიეთოქსისილანთან 1:3:1 თანაფარდობით პლატინის ოჯახის კატალიზატორების თანაობით.



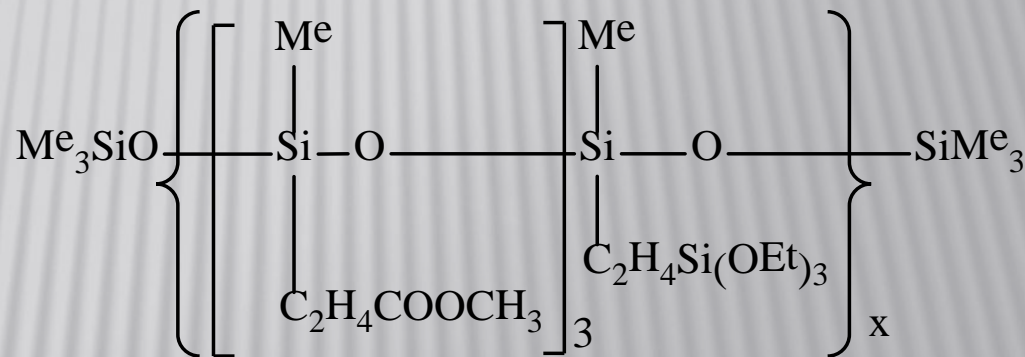
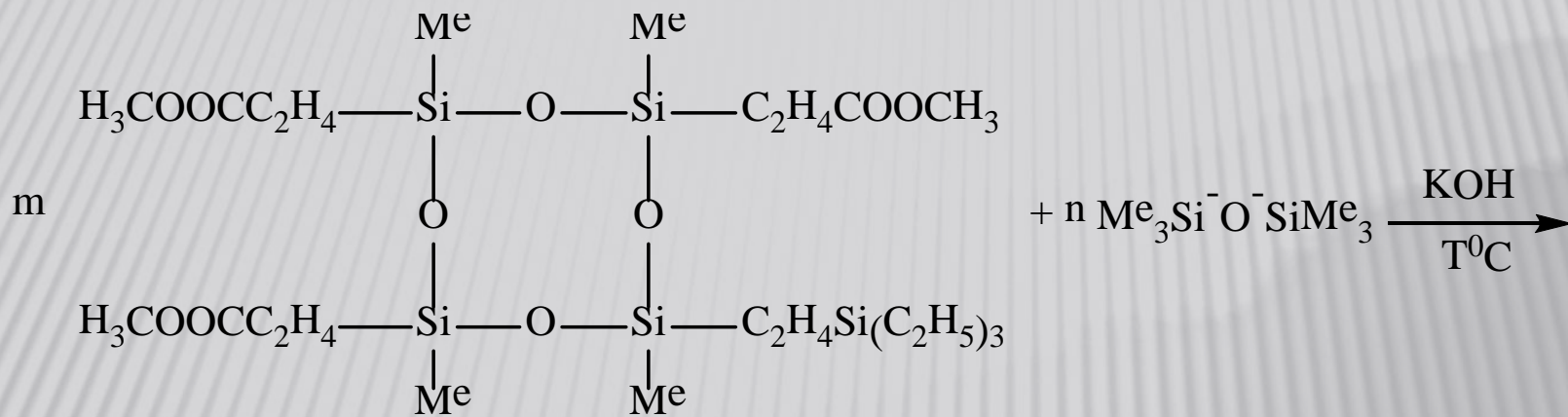
სქემა 2. D_4^H -ის ჰიდრიდული მიერთება აკრილის მჟავას მეთილის ეთერთან და ვინილტრიეთოქსისილანთან

შესწავლილ იქნა I და II ნივთიერების პოლიმერიზაციის რეაქციები ნუკლეოფილური კატალიზატორის - ფხვიერი, უწყლო KOH-ის თანაობისას (0.01 მას. %), მშრალ გამხსნელში (C=0.8606 მოლი/ლ), ინერტული აირის არეში, 60-80°C ტემპ. ინტერვალში. ციკლური ნაერთის პოლიმერიზაცია მიმდინარეობს ძალიან ნელა, 80-100 სთ-ის განმავლობაში. ოპტიმალური ტემპერატურა - 80-90 °C.



$$\eta_{\text{sp}} = 0.23.$$

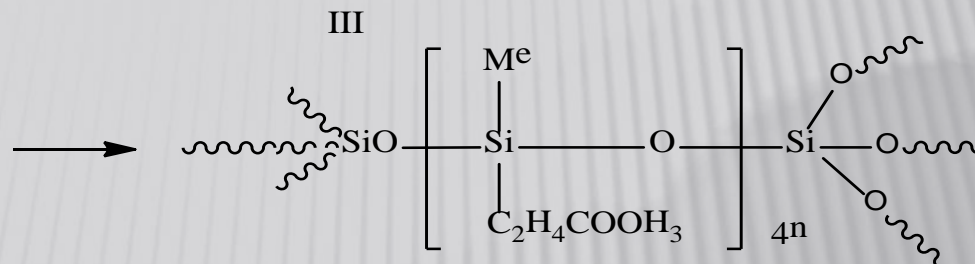
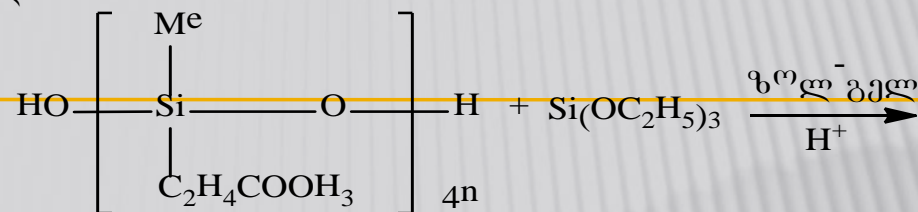
სქემა 3. I ნივთიერების პოლიმერიზაციის რეაქცია



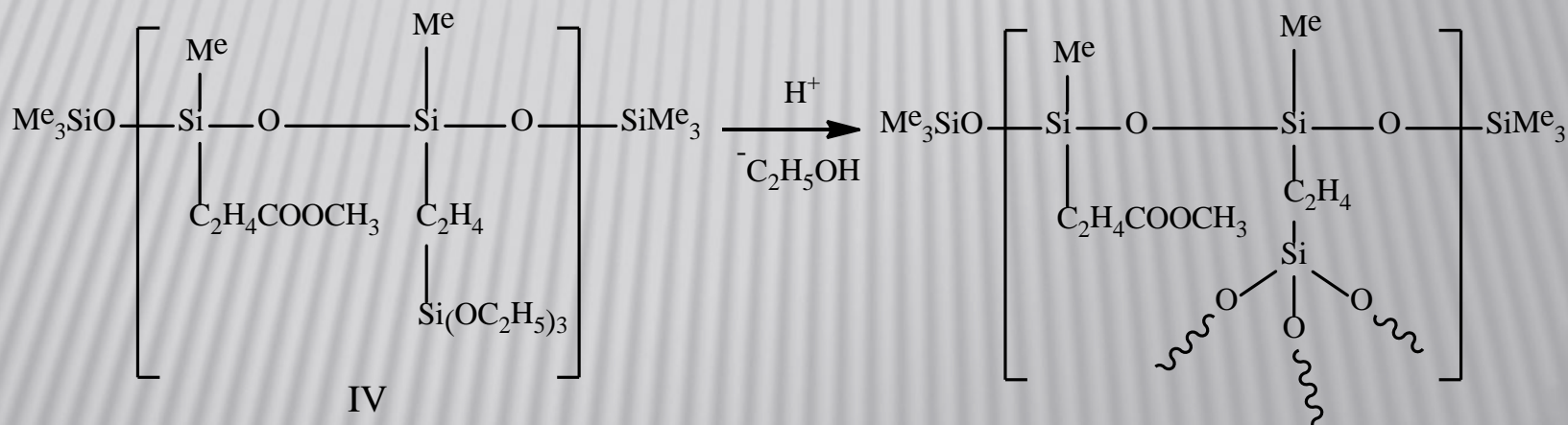
სადაც $m:n=8:1$. IV^1 (60°C), IV (80°C),
 $\eta_{\text{sp}} = 0.14$ (IV^1); 0.27 (V).

სქემა 4. II ნივთიერების თანაპოლიმერიზაციის რეაქცია ჰექსამეთილდისილოქსანთან

ზოლ-გელური რეაქციები III და IV
პოლიმერისთვის:



შეკერილი პოლიმერები



IV

ლითიუმის ტრიფლატის დამატებით მიღებულია მყარი პოლიმერ-ელექტროლიტები. შესწავლილია მიღებული მემბრანების იონ-გამტარებლობა და მისი დამოკიდებულება ტემპერატურაზე. ელექტროგამტარებლობა შეადგენს $10^{-6} - 10^{-8} \text{ S/cm}$.

ბიორგანული ქიმიის მიმართულება

ქიმიის მეცნ. დოქტორი, სრული პროფესორი
რამაზ გახოკიძე

ბიორგანული ტექნოლოგიების ინსტიტუტი

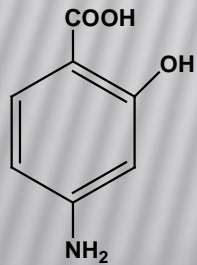
დირექტორი რამაზ გახოკიძე

ნიტროზო (NO) ჯგუფის შემცველი ნახშირწყლების წარმოებულების სინთეზი

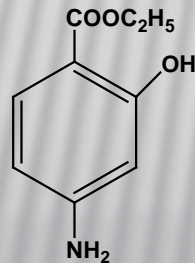
რ. გახოკიძე, ნ. სიდამონიძე, რ. ვარდიაშვილი, მ. ნუცუბიძე

უკანასკნელ წლებში, ახალი, ბიოლოგიურად და ფარმაკოლოგიურად აქტიური ნაერთების სინთეზის მიზნით, მნიშვნელოვანი ადგილი უკავია სხვადასხვა ტიპის ორგანული ნაერთის ნახშირწყლით მოდიფიკაციას. ჩვენი მიზანი იყო ნიტროზოჯგუფის შემცველი ნახშირწყლების წარმოებულების მიმართულებით კვლევების ჩატარება და NO ჯგუფის შემცველი ნახშირწყლების სინთეზის მეთოდის დამუშავება. ორგანული ნაერთების მოდიფიკაციისათვის გლიკოზიდების გამოყენებამ შესაძლოა შეცვალოს ერთის მხრივ მათი ბიოლოგიური და ფიზიოლოგიური აქტივობა, ხოლო მეორეს მხრივ შეამციროს მათი ტოქსიკურობა.

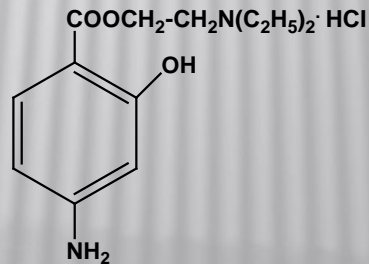
როგორც ცნობილია, ბენზოლის ბირთვის შემცველი ნაერთები საინტერესოა ფიზიოლოგიური აქტივობის მხრივ. მაგალითად: ტუბერკულოზის საწინააღმდეგო ძვირფას პრეპარატს წარმოადგენს 3-ამინოსალიცილის მჟავა (პასმ), 3-ამინობენზოლის მჟავა შეიძლება განვიხილოთ როგორც ვიტამინი, რომელიც ცხოველთა ბევრვანთა საფარის ზრდასა და პიგმენტაციას უწყობს ხელს, ასევე ცნობილი პრეპარატი, სტრეპტოციდი -3-ამინობენზოსულფომჟავას ამიდი (სულფანილმჟავა), ანესთეზინი, რომელსაც მედიცინაში იყენებენ ანესტეზიისათვის, ნოვოკაინი (β-დიეთილამინოეთილის ეთერი) და ა.შ.



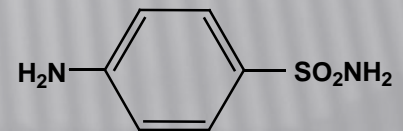
3-ამინოსალიცილის
მჟავა



ანესთეზინი

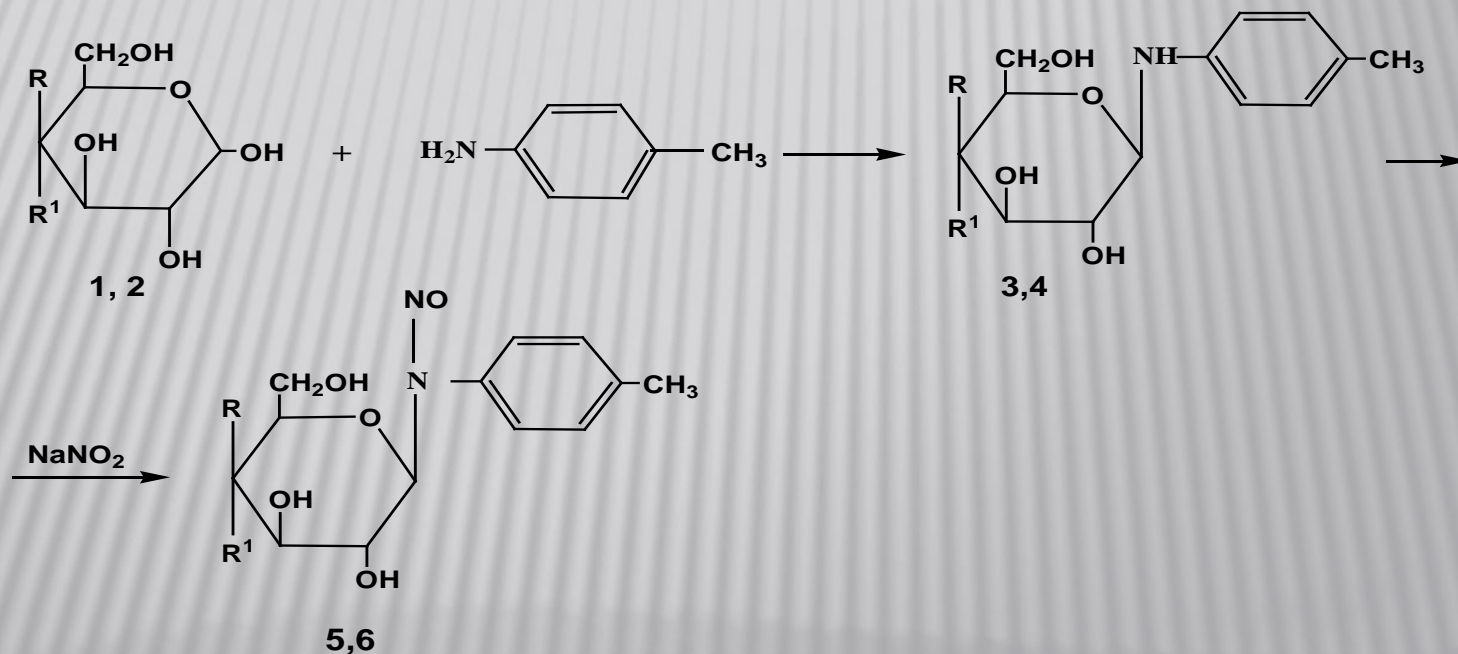


ნოვოკაინი



სტრეპტოციდი

საწყის ნივთიერებად აღებულ იქნა გლუკოზის და გალაქტოზის 3-ტოლუიდინთან კონდენსაციის პროდუქტი N-3-ტოლილ-β-D-გლუკოპირანოზა და N-3-ტოლილ-β-D-გალაქტოპირანოზა (1,2). მიღებულ იქნა შესაბამისი ნირტოზოჯგუფის შემცველი ნივთიერებები (5,6), შედგენილობა დადგენილია ინფრაწითელი სპექტრომეტრული მეთოდით [იწ-სპექტრი, ν , სმ^{-1} : 760, 915 (ბენზოლი); 2980-3300 (OH), 1525 (-N-N=O)]. ასევე განსაზღვრულ იქნა ლღობის ტემპერატურა [$T_{\text{ლღ.}}$ 133-134,5°C (5), 97-99°C (6)], R_f 0.72 (სპირტი), $[\alpha]_D^{16} + 15^\circ$ (c 0.41, სპირტი) (5), $[\alpha]_D^{16} + 22^\circ$ (c 0.52, სპირტი) (6), 1520-1510 (-N-N=O).



R=H, R¹=OH (1,3,5) გლუკოზა
R=OH, R¹=H (2,4,6) გალაქტოზა

გმადლობთ ყურადღებისთვის