

**Republic Conference of  
Young Scientists**

**Chemistry Today**

**-2011**

**26<sup>th</sup> February, 2011**



**Georgian Technical University**

**Tbilisi, Georgia**

<http://chemistry.ge/conferences/rcys2011>

**Republic Conference of Young  
Scientists**

**Chemistry Today -2011**

**26<sup>th</sup> February, 2011**

**Georgian Technical University**

**Tbilisi, Georgia**



<http://chemistry.ge/conferences/rcys2011>



## **Organization Committee**

---

Prof. Elizbar Elizbarashvili	Georgian Technical University
Assoc. Professor Zurab Geliashvili	Georgian Technical University
Assist. Professor Irma Lagvilava	Georgian Technical University
Khatuna Topuria	Georgian Technical University
Nino Obolashvili	Georgian Technical University

## **Support**

---

Shota Rustaveli National Science Foundation

## **Partners**

---

Georgian Technical University

Association of Professional Chemists of Georgia

*Republic Conference of Young Scientists -2011  
26<sup>th</sup> February, 2011  
Georgian Technical University  
Tbilisi, Georgia*



# Schedule of Events

*Republic Conference of Young Scientists -2011*  
*26<sup>th</sup> February, 2011*  
*Georgian Technical University*  
*Tbilisi, Georgia*



## **26 February, 2011**

---

10.00–11.00	Registration
11.00–11.30	Opening ceremony
11.30-13.00	Plenary session
13.00–13.30	Coffee Brake
13.30-15.30	Poster session
15.30-16.30	Closing ceremony
16.30-	Lunch

*Republic Conference of Young Scientists -2011  
26<sup>th</sup> February, 2011  
Georgian Technical University  
Tbilisi, Georgia*





# Oral Presentations

*Republic Conference of Young Scientists -2011*  
*26<sup>th</sup> February, 2011*  
*Georgian Technical University*  
*Tbilisi, Georgia*





**Prof. Shota Samsoniya,**

Iv. Javakhishvili Tbilisi State University

“The main synthetic directions of biologically active compounds”

---



**Prof. Tamaz Agladze,**

Georgian Technical University

“Stability of nanoparticles. Size dependent thermodynamics and kinetics”

---



**Prof. Elizbar Elizbarashvili,**

Georgian Technical University

“Tips and tricks of effective presentation”



# Table of Contents

*Republic Conference of Young Scientists -2011*  
*26<sup>th</sup> February, 2011*  
*Georgian Technical University*  
*Tbilisi, Georgia*



Schedule of Events .....	5
Oral Presentations .....	9
Table of Contents .....	13
Abstracts.....	17
ბიოლოგიურად აქტიური სინთეზური და ბუნებრივი ორგანული ნაერთები: სინთეზი, გამოყოფა, კვლევა.....	19
ნაწონაწილაკების სტაბილურობა ზომაზე დამოკიდებული თერმოდინამიკა და კინეტიკა .....	21
THE NOVEL ENVIRONMENTALLY FRIENDLY FLOURESCENT DYES .....	23
ON THE FORECASTING OF GLASS-CERAMICS RECEIVING FROM TECHNOGENIC RAW MATERIALS CONTAINING COMPOSITE .....	25
NEW MORDANT DYES ON THE BASE OF MACROCYCLIC AZOMETHINE COMPOUNDS .....	27
PHYSICAL-CHEMICAL PROCESSES IN THE FRIT TECHNOGENIC RAW MATERIAL CONTAINING COMPOSITE.....	29
СИНТЕЗ И ВИРТУАЛЬНЫЙ БИОСКРИНИНГ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-(1- АДАМАНТИЛ)БЕНЗИМИДАЗОЛА.....	31
აზომეულლების რეაქციები ფიშერის ფუმის ბისანალოგების საფუძველზე.....	33
СИНТЕЗ 4-R-N-АДАМАНТОИЛАНИЛИДОВ И 5(6)-АЛКОКСИ-2-(1- АДАМАНТИЛ)БЕНЗИМИДАЗОЛОВ.....	35
დიპირლონაფთალინების ამიდური ნაწარმების მას-სპექტრებში ფრაგმენტაციის თავისებურებანი .....	37
INVESTIGATION IN THE FIELD OF 2-ETHOXYCARBONYL-5-PHENYLINDOLE.....	40
SYNTHESIS OF NEW POLYNUCLEAR NITROGEN CONTAINING HETEROCYCLIC SYSTEMS .....	42
NUTRITIONAL AND MEDICAL NATURE OF OAK ACETUM .....	44
THE INFLUENCE OF POTASSIUM FERROCYANIDE ON TOTAL PHENOLS AND IRON OF WINE ....	46
THE STABILITY OF NANOSIZED SILVER IN AQUEOUS MEDIA .....	48
ON THE ESSENCE OF INORGANIC COMPONENT PART OF PKHOVELI PELOID .....	49



SELECTION OF MICROBIAL CAROTENOIDS .....	51
THE EFFECT OF SUPERPLASTIFIERS' ADDITIONS ON CEMENT AND CONCRETE PROPERTIES.....	53
მდ. არაგვის ფსკერული ანალიზის შედეგები .....	54
INFLUENCE OF NATURAL AND ANTHROPOGENIC FACTORS ON NITRATE AND NITRITE IONS IN TRANSBOUNDARY RIVER KURA "MTKVARI" WATER IN TBILISI CITY AREA .....	55
CHROMATOGRAPHIC BEHAVIOR OF RISPERIDONE IN IONIC INTERACTION AND MICROEMULSION CHROMATOGRAPHIC SYSTEMS: STUDY OF PHARMACOKINETICS OF RISPERIDONE .....	58
ANALYSIS OF CHIRAL AMINO ACIDS IN CEREBROSPINAL FLUID SAMPLES LINKED TO DIFFERENT STAGES OF ALZHEIMER DISEASE.....	60
HELLEBORUS CAUCASICUS - კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა ნაწილებში და ფოთლებში სტეროიდულ ნივთიერებათა დაგროვების დინამიკა .....	62
FEASIBILITY OF APPLICATION OF HYDROGEN FORM NATURAL MORDENITE IN THE PROCESS OF CLEANSING OF NITROUS GAS CONTAINING AIR .....	65
THE NOVEL FLUORESCENT PROBES WITH ACTIVE THIOCYANATE GROUPS.....	67
სილიკატებზე დამყნობილი ახალი 24-წევრიანი მაკროციკლური პოლიაზომეთინები .....	69
ახალი 24-წევრიანი პოლიაზომეთინური მაკროციკლური ნაერთების სინთეზი	72
CHEMICAL COMPOSITION OF THE AROMATIC SPICY HERBS - CARUM CARVI L. ....	75
QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF POSSIBLE TAUTOMERIC TRANSFORMATIONS OF CYTOSINE	78
იზონიკოტინჰიდრაზიდის (ტუბაზიდის) ლითონებთან კომპლექსწარმოქმნის უნარიანობაზე გამსწნელის გავლენის ქვანტურ-ქიმიური გამოკვლევა.....	79
Authors Index .....	81
შენიშვნებისათვის.....	86

# Abstracts

*Republic Conference of Young Scientists -2011  
26<sup>th</sup> February, 2011  
Georgian Technical University  
Tbilisi, Georgia*



## ბიოლოგიურად აქტიური სინთეზური და ბუნებრივი ორგანული ნაერთები: სინთეზი, გამოყოფა, კვლევა

### შოთა სამსონია

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო  
უნივერსიტეტი, ქიმიის დეპარტამენტი, ი. ჭავჭავაძის გამზ., 3, 0179,  
თბილისი, საქართველო  
shota.samsonia@tsu.ge

არსებობს პოტენციური ბიოლოგიური აქტიურობის მქონე ნივთიერებების მიღების ორი გზა. პირველი გზა გულისხმობს ბუნებრივი ნედლეულის (ფლორის) გამოყენებას, ხოლო მეორე – სინთეზს.

ორგანული სინთეზის ძირითადი მიმართულებებია:

- ახალი ქიმიური სტრუქტურის, პოტენციური ბიოლოგიური აქტიურობის მქონე ნაერთების შექმნა;
- ცნობილი ბიოლოგიურად აქტიური ბუნებრივი და სინთეზური ნაერთების ქიმიური მოდიფიკაცია;
- ცნობილი ბიოლოგიურად აქტიური ბუნებრივი და სინთეზური ნაერთების სტრუქტურული ანალოგების მიღების სინთეზური მეთოდების დამუშავება და სინთეზის რაციონალური გზების ძიება.

**სტრუქტურული ანალოგების მიღების საინტერესო მაგალითებიდან აღსანიშნავია:**

- ალიზარინის (ენდროს ფესვები, *Rubia tinctoria*) სტრუქტურული ანალოგის მიღება ანტრაცენიდან (1868 წელი, გრეგე და ლიბერმანი);
- ვიტამინ C, ასკორბინის მჟავას, აგებულების დადგენა და შემდეგ მისი ლაბორატორიული და საწარმოო სინთეზი D-გლუკოზიდან (1934 წელი რაიხშტაინი).
- 1953 წელი, კორანას მიერ დეზოქსირიბონუკლეინის მჟავას (დნმ, ორმაგი სპირალი – უოტსონი და კრიკი) ფრაგმენტის – ბიოლოგიურად აქტიური გენის სრული სინთეზი (ნობელის პრემია).

მოხსენებაში განხილულია ნაერთთა კლასები, რომელთა სინთეზის მეთოდების დამუშავება წარმოებს საქართველოს სამეცნიერო დაწესებულებებში: ორგანული არომატული ჰეტეროციკლური ნაერთები; შუალედური პროდუქტები და სტრუქტურული ანალოგები; სტეროიდების წარმოებულები; ბიოდეგრადირებადი პოლიმერული მასალები; ადამანტანის წარმოებულები; ნახშირწყლები; ენანტიომერები; მათემატიკური ქიმია და კოორდინაციული ნაერთები და სხვ.

## ნანონაწილაკების სტაბილურობა ზომავზე დამოკიდებული თერმოდინამიკა და კინეტიკა

პროფ. თამაზ აგლაძე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი,  
tamazagladze@emd.ge

დავსვათ შეკითხვა - ახდენს კი გავლენას მატერიის ზომის და მოცულობის ცვლილება მის თვისებებზე?

ზომის კლებასთან ერთად კლებულობს მასა და შესაბამისად გრავიტაციის ძალის მოქმედება და ძლიერდება ზედაპირული ძალების გავლენა. ნივთიერების ზომის მეტრის ერთი მემილიონედ ნაწილამდე შემცირებისას მიიღება ერთი ნანომეტრის განზომილების კლასტერი, რომელიც შედგება დაახლოებით 300 ატომისაგან, რომელთა უმეტესი ნაწილი განლაგებულია კლასტერის ზედაპირზე. ზედაპირულ ატომებს გააჩნიათ ჭარბი ქიმიური ენერგია, რომელიც არ არის კომპენსირებული მეზობელ ატომებთან ურთიერთობით.

ჭარბი ენერგიის მატარებელი ნანონაწილაკები ხასიათდებიან უნიკალური ფიზიკური, ქიმიური და მექანიკურ თვისებებით, რაც განაპირობებს მათ ფართო გამოყენებას ახალი თაობის “ჭკვიანი მასალებში”. საყოველთაოდ აღიარებულია, რომ XXI საუკუნეში “ჭკვიანი” ნანონაწილაკების გამოყენება გამოიწვევს რევოლუციურ ცვლილებებს ბიომედიცინის, ენერჯის გარდაქმნის და შენახვის სფეროებში, ინფორმაციულ და სხვა ტექნოლოგიებში.

ამავე დროს, იგივე მოვლენები, რომლებიც განსაზღვრავენ ნანონაწილაკების მასალების განსაკუთრებულ თვისებებს, იწვევენ არასასურველ პროცესებს, რომლებიც ზღუდავენ ამ მასალების გამოყენებას პრაქტიკაში. ეს დაკავშირებულია ჭარბი ენერჯის მქონე ნანონაწილაკების არასტაბილურობასთან. ასეთი სტრუქტურები განიცდიან აგრეგაციას (ნანონაწილაკების გაერთიანება მსხვილ აგრეგატებში), რის შედეგად წარმოიქმნება ნაკლებად აქტიური მაკროზომის ნივთიერებები, ან კოროზიას, რომლის შედეგად მცირდება ნანონაწილაკის მასა, იცვლება მისი ქიმიური შემადგენლობა.

ამგვარად, ნანონაწილაკების მდგრადობა და მისი მართვა წარმოადგენს თანამედროვე ნანოტექნოლოგიის ცენტრალურ პრობლემას. მდგრადობის კლასიკური თერმოდინამიკური კრიტერიუმები, რომლებიც ცალსახად განსაზღვრავენ მაკრო ნივთიერებათა სტაბილურობას, არ მიესადაგება ნანოსტრუქტურულ სისტემებს. მაგალითად, “კეთილშობილი” ლითონები (პლატინა, ოქრო, ვერცხლი, მათი შენადნობები), რომლებიც თერმოდინამიკურად მდგრადია აგრესიულ (დამჟანგველ) გარემოში, კარგავენ “კეთილშობილ” თვისებებს და განიცდიან კოროზიას ფაზათა გაყოფის საზღვარზე (აირებთან, სითხეებთან, ცოცხალ უჯრედთან) ისევე, როგორც ჩვეულებრივი ტექნიკური ლითონები (სპილენძი, რკინა, თუთია და სხვა).

ჩვენ განვიხილავთ თანამედროვე თეორიულ და პრაქტიკულ მიდგომებს, რომელთა დანიშნულებაა ნანოსტრუქტურული მასალების მდგრადობის უზრუნველყოფა, რათა შესაძლებელი გახდეს მათი განსაკუთრებული ანტიბაქტერიული, მაგნიტური, ოპტიკური, ქიმიური და სხვა თვისებების გამოყენება თანამედროვე ტექნოლოგიებში და მოწყობილობებში.

## THE NOVEL ENVIRONMENTALLY FRIENDLY FLOURESCENT DYES

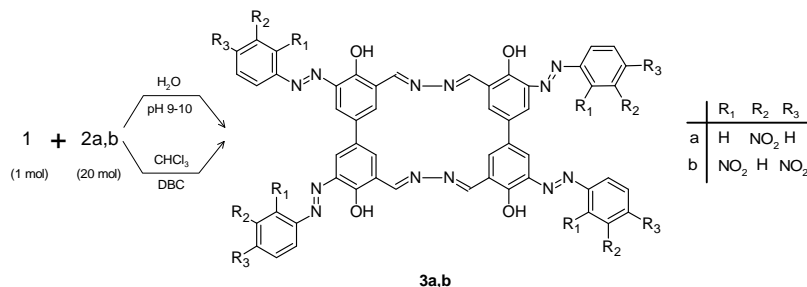
Nino Kverashvili\*, Irma Lagvilava, Elizbar Elizbarashvili

Division of Organic Chemistry, Department of Chemical Technology, Georgian Technical University, 77 Kostava Str., Tbilisi, 0175, Georgia,  
ninoni1990@mail.ru

Azo dyes of deep colors still remain interesting due to problems of the synthesis of multiple azo containing chromophore systems [1-3].

Azo coupling reaction between diazonium salts **2a** or **2b** and 20-membered polyazomethine dye **1** has been carried out in polar media (aqueous solution of NaOH). Diazonium salts in the form of tetrafluoroborates have been prepared from corresponding primary aromatic amines, sodium nitrite and tetrafluoroboric acid, isolated and dried on air.

Azo coupling reaction between **1** and **2a** has been carried out by adding of water solution of diazonium salt to the alkali solution of **1**. Coupling was usually accompanied by some evidence of decomposition; however 58-59% yields of main product **3a** was usually obtained. The optimization of azo coupling process showed that the optimal molar ratio of diazo and azo partners is 1:20 mole/mole (scheme 1).



Scheme 1. Azo coupling reaction between **1** and **2a** or **2b** in molar ratio 1:20

2,4-dinitrophenyldiazonium tetrafluoroborate (**2b**) reacts with **1** in the same manner and gives tetra-substituted macrocyclic polyazomethine compound **3b** as a main product with the yield up to 61%. Azo coupling reaction has been carried out



in the chloroform media for the aim of increasing reaction ability of diazonium cation. Dibemzo-18-crown-6 (DBC) was used as a phase transfer catalyst. Unfortunately azo coupling was successful only with **2b** [4].

The disperse azo-polyazomethine dyes **4a** and **4b** are insoluble into common polar and non-polar organic and inorganic solvents. They were applied at 1.8-2% depth on paper, polyester and nylon fibers as a disperse compositions. The results are listed in table 1.

**Table 1. Color fastness and exhaustion of dyes 3a, 3b, 4a and 4b on fibers**

Dye	Hue	Fiber	Exhaustion, %	Fastness against						
				Light	Wash	Rubbing (Dry)	Rubbing (Wet)	Acid	Alkaline	Sublimation
3a	Brown	Polyester	80	4-5	4-5	4-5	4-5	4-5	4	5
3b	Dark brown	Polyester	80	4-5	4-5	4-5	4-5	4-5	4	5
3a	Brown	Nylon	85	4-5	4-5	4-5	4-5	4-5	4	5
3b	Dark brown	Nylon	85	4-5	4-5	4-5	4-5	4-5	4	5

Dyes **4a** and **4b** gave brown and dark brown hues respectively with the same excellence properties, as mentioned above. The dyed paper, nylon and polyester showed good-excellence fastness to light, washing, rubbing and perspiration and excellence fastness to sublimation. The insignificant changes of levelness after washing indicate to good dye penetration and affinity to the employed fibers and may belong to environmentally friendly dyes.

#### References:

1. Petrova-Miladinova P., Konstantinova T.N. *Dyes and Pigments*. 2005, 67, 1, 63.
2. Shen Y., Wanga X., Xua, S., Lia, H. *Current Applied Physics*. 2007, 7, 1, 96.
3. Elsayed Sh. A., El-Hendawy A.M., Mostafa S. I. Jean-Claude B.J., Todorova M., Butler I. S. *Bioinorg Chem Appl*. 2010, 149149.
4. Elizbarashvili E., Matitaishvili T., Topuria Kh. *J. Braz. Chem. Soc*. 2007, 18, 6, 1254.

## **ON THE FORECASTING OF GLASS-CERAMICS RECEIVING FROM TECHNOGENIC RAW MATERIALS CONTAINING COMPOSITE**

**D.G. Kotrikadze**

*Georgian Technical University, 77, Kostava str., Tbilisi, Georgia,  
Diana.kotrikadze@hotmail.com*

The theory and the practice of glass-ceramics receiving is based on the results obtained by experiments. For achievement of an objective, first of all, the knowledge of glass structure and technological factors of this glass is necessary. The task becomes more difficult if basic composite consists of technogenic raw materials. It is clear that even theoretical estimation of glass-ceramics receiving possibility involves some problems.

Overcoming of these difficulties is possible if we will take into account the hypothesis offered by Rudolf Muller. According to this hypothesis the impact of solid state long-range geometrical order to the total energy of its atoms' interaction is negligible – 90-99 percents of this energy is related to the energy of short-range order. Therefore, in crystal and glassy state the conclusion of identity of atoms' chemical interaction has been made.

Proceeding from this conclusion, in various kinds of glasses, among them received on the basis of technogenic raw materials, we can discuss about thermodynamic probability of structural groups' formation. The attempt of realization of this possibility is the main objective of the presented work.

As a result of the research the following subsequence of glass-ceramics receiving possibility has been formed:

- as a result of basic mineral component parts existence and their interaction in the composite is expected the drawing of compound's map in conversion to normative minerals;
- developing of database for thermodynamic parameters of basic and final compounds' (reagents and products) interaction: standard molar of energetically profitable processes' (reactions)  $\Delta G_T^0 = f(T)$  function;

- determination of ratio of quantities of “bonded”  $\text{SiO}_2$  ( $_{\text{SiO}_2^b}$ ) and of separated crystal phase (Crys);
- selection of nucleator (in case of necessity) by taking the rule of epytaxy into account;

It was established by researches that in case of  $_{\text{SiO}_2^b}/\text{Crys} > 0,5$ , coarse-grained and volumetrically unequal distribution crystal phase is separated by recrystallization in the products received by thermal processing, even in case of appropriate nucleator’s existence. Microstructure distinctive for glass-ceramics is reached when mentioned ratio is equal to 0.1-0.2.

Results of estimation of possibility of glass-ceramics receiving from specific technogenic raw materials containing basic composite are given in the work. Comparison of predicted phenomena with experimentally received results gives points to the possibility of use of offered forecasting’s subsequence after making a number of adjustments.

## **NEW MORDANT DYES ON THE BASE OF MACROCYCLIC AZOMETHINE COMPOUNDS**

**Shorena Kenchadze\*, Tea Matitaishvili, Elizbar Elizbarashvili**

*Division of Organic Chemistry, Department of Chemical Technology, Georgian Technical University, 77 Kostava Str., Tbilisi, 0175, Georgia  
shorena.kenchadze@yahoo.com*

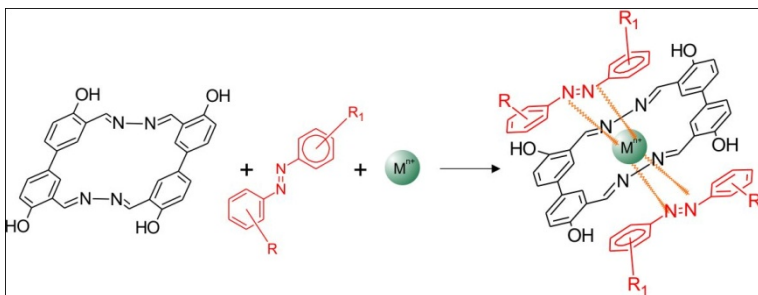
Metal containing azomethine compounds are very well known for a long time and currently used in various fields of science, diagnostics and industry. They find very important application in oxidation reaction as dioxygene carriers for modeling biosystems. Furthermore they are suitable dyes for dyeing or printing natural and synthetic fibers, *i.e.* wool, leather or polyamide or polyurethanes as well as coloring inks for ink-jet printers [1,2].

In the current research we offer efficient method of the synthesis of metal containing multifunctional (azoic and azomethine) mordant dyes on the base of 20-membered cyclic polyazomethine compound **1** [3].

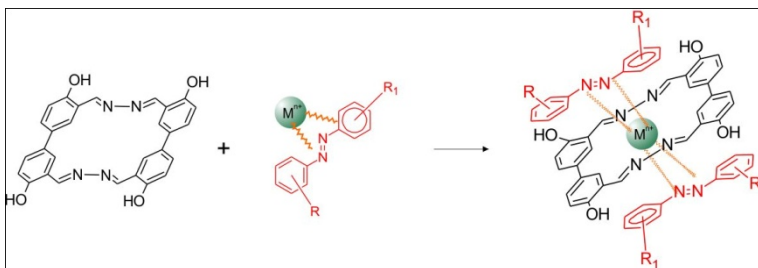
The desired compounds may be obtained by:

- interaction of **1** and azoic dyes in the presence of metal ions (scheme 1) ;
- interaction of **1** and metal containing azoic mordant dyes (scheme 2) ;
- interaction of metalized **1** and azoic dyes (scheme 3).

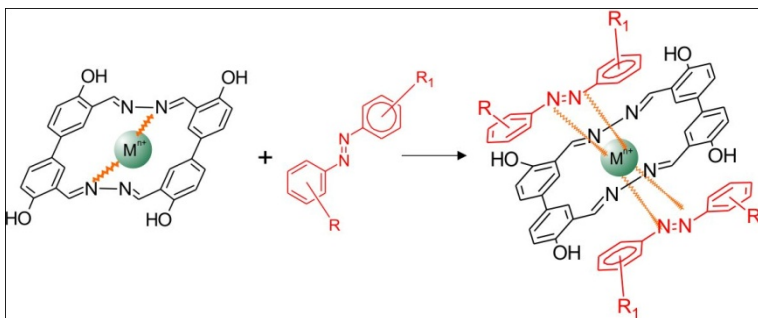
All obtained compounds belong to multifunctional dyes and are suitable for dyeing or printing of nitrogen containing natural and synthetic fibers. In addition, we hope, they would find application in other fields too due to its multifunctionality, which is our further research subject.



Scheme 1.



Scheme 2.



Scheme 3.

### References:

1. Casellato U., Tamburini S., Tomazin P., Vigato P.A. *Inorg. Chim. Acta*, 2002, 341, p. 118-126
2. Baumann H., Grychot K. US Pat. No. 4489002.
3. Elizbarashvili E., Matitaishvili T., Topuria Kh. *Journal of Brazilian Chemical Society*. 2007, 18, 6, 1254-1258.

**PHYSICAL-CHEMICAL PROCESSES IN THE FRIT TECHNOGENIC RAW  
MATERIAL CONTAINING COMPOSITE**

**N.J. Rachvelishvili**

*Georgian Technical University, 77, Kostava str., Tbilisi, Georgia,  
N.Rachvelishvili@mail.ru*

Processes of thermal processing of composites consisting of basic material, running during receiving of enamel frit, are completely studied worldwide. The essence of interaction between enamel chemistry and raw materials traditional for technology, as well as subsequence of these interactions under conditions of temperature rise are determined.

There are very few data about the same processes in the composites, one of component parts of which is raw material, which is complex by its nature. Technogenic raw materials also refer to this type of raw materials.

In these composites, the processes running during thermal processing for the most part are studied by experimental methods, and that is very labour-consuming and requires long-time researches, and quite often became the reason of significant errors.

Mentioned situation is related to multimineral character of technogenic raw material. Most of these raw materials consist of more than 10-15 compounds having natural and technogenic origin. That fact requires from each of them the knowledge of high-temperature behavior both individually, and in the integration of other component parts of composite.

The method of forecasting of processes running under conditions of temperature rise in the enamel frit composite containing technogenic raw material is offered and tested. This method is based on the basic postulates of chemical thermodynamics, phase equilibrium and petrochemistry. From thermodynamics – the method of minimization of Gibbs free energy (MMGFE), from phase equilibrium – study of diagrams of system position, and from petrochemistry – of possibilities of normative minerals determination are used.

The example of forecasting of high-temperature behavior of frit basic material containing the specific technogenic raw material is represented. In the capacity of

technogenic raw material are used the residuals of Chiatura manganese ore beneficiation. Composite formulation corresponds with accepted systems used worldwide for receiving of enamels of different assignment.

Physical and chemical processes running in the composite that are determined by four options of MMGFE implementation are also evaluated thermodynamically, the essence and subsequence of composite component parts' interaction, as well as phase composition of products received as result of these processes, are predicted.

Theoretically predicted phenomena are tested by experiments. The testing reveals satisfying correspondence between predicted and experimentally received results.

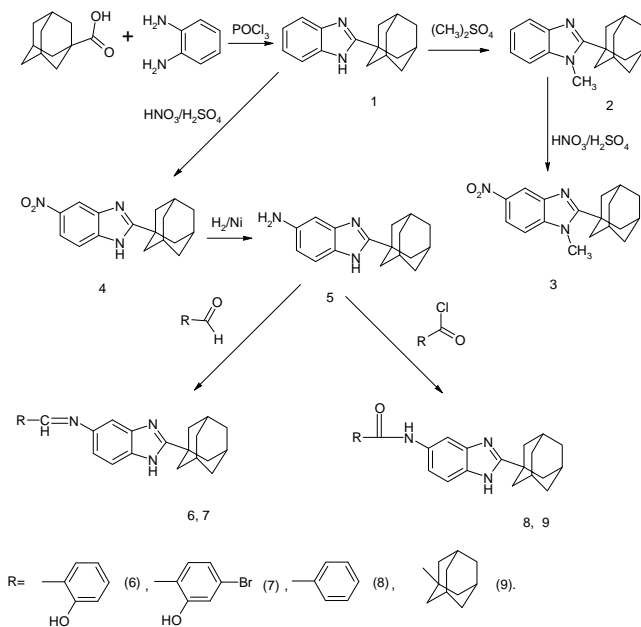
## СИНТЕЗ И ВИРТУАЛЬНЫЙ БИОСКРИНИНГ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-(1-АДАМАНТИЛ)БЕНЗИМИДАЗОЛА

Т. Дж. Букия\*, Д. С. Зурабишвили, Э. Н. Элизбарашвили,  
Ш. А. Самсония

Департамент химии факультета точных и естественных наук,  
Тбилисского государственного университета имени Ив. Джавахишвили,  
пр. Ил. Чавчавадзе 3, Тбилиси, 0179, Грузия  
t.bukia@yahoo.com

Широкий спектр биологического действия производных адамантана делает перспективным исследование по синтезу и изучению фармакологической активности в ряду адамантильных производных бензимидазола [1-4].

Разработан способ получения 2-(1-адамантил)бензимидазола. Синтезированы 1-метил-, 1-метил-5(6)-нитро-, 5(6)-нитро-, 5(6)-амино-2-(1-адамантил)бензимидазолы по схеме:





Соединение 1 было получено кипячением смеси о-фенилендиамина и адамантан-1-кар-боновой кислоты в  $\text{POCl}_3$  с 92% выходом. Осуществлено N-алкилирование 1-го диметил-сульфатом в ацетоне, 1-метил-2-(1-адамантил)бензимидазол (2) получен с высоким выходом. Нитрованием соединений 1 и 2 нитрующей смесью выделены соответствующие 5(6)-нитропродукты – 3 и 4.

Каталитическим восстановлением 5(6)-нитро-2-(1-адамантил)бензимидазола (4) в спиртах (метанол, этанол) в присутствии никеля Ренея получено аминопроизводное (5), которое было выделено в виде гидрохлорида. Соединения 6 и 7 получены конденсацией эквивалентных количеств 5(6)-амино-2-(1-адамантил)бензимидазола и соответствующего альдегида в метиловом и этиловом спиртах, а ацилированием соединения 5 хлорангидридами карбоновых кислот в присутствии основания (ТЭА, NaOH) были получены соответствующие 5(6)-(N-ациламино)-2-(1-адамантил)бензимидазолы (8, 9).

С целью прогноза возможной биологической активности синтезированных нами соединений мы провели виртуальный биоскрининг интернет-системой **PASS** ([www.ibmc.msk.ru/pass/](http://www.ibmc.msk.ru/pass/)) Полученные результаты изложены в докладе.

### **Литература**

1. Морозов И.С., Петров В.И., Сергеева С.А. Фармакология адамантанов. Волгоградская ме-дицинская академия, Волгоград, 2001, 320с.
2. Литвинов В.П., ХГС, 2002, № 1, с.12-39.
3. Зурабишвили Д.С., Ломидзе М.О., Самсония Ш.А., Веквет А.О., Кацмайер У. ХГС, 2008, №8, с.1172-1182. (*Chem. Heterocycl. Comp.*, 2008, v. 44, N.8, pp. 941-949)
4. Zurabishvili D.S., Lomidze M.O., Trapaidze M.V., Samsoniya Sh.A. *Nova Science Publ-shers*, 2010, pp. 47-98.

**Благодарность:** Данный проект осуществлен при финансовой поддержке национального научного фонда Грузии (*Грант № GNSF/STO8/4-413*). Любая мысль, изложенная в данной публикации принадлежит авторам. Выражаем благодарность службе академического обмена Германии (DAAD) за поддержку сотрудничества и программы обмена между Тбилисским государственным университетом им. Иване Джавахишвили и университетом Саарланда (Германия).

**ახორეულლებიხ რეაქციები ფიზარის ფუძის  
ბისნანლოგების სარეუველზე**

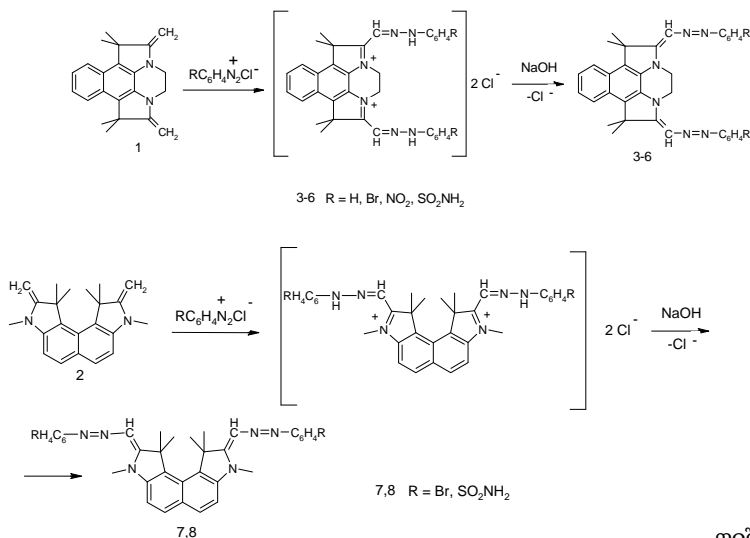
**გ. ფანცულაია, ნ. ნიკოლეიშვილი\*, მ. ტრაპაიძე, შ. სამსონია**

*ივ. ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ქიმიის  
დეპარტამენტი, 3.ი. ჭავჭავაძის გამზ., თბილისი, საქართველო*  
[shota.samsonia@tsu.ge](mailto:shota.samsonia@tsu.ge)

ჩაუნაცვლებელი ჰეტეროციკლების, ინდოლოინდოლებისა და ბენზოპიროლოინდოლის ბირთვში მიმდინარე აზომეულლების რეაქციების ძირითად პროდუქტებს წარმოადგენენ პიროლის ბირთვის  $\alpha$  ან  $\beta$ -მდგომარეობაში მონოჩანაცვლებული აზონაერთები [1, 2, 3]. წინამდებარე ნაშრომში განხილულია აზომეულლების რეაქციები ზემოაღნიშნული ჰეტეროციკლების ბაზაზე მიღებული ნაწარმების – ფომერის ფუძის ბისნანლოგების მოლეკულებში.#

ჩატარებულ იქნა 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]ქინოქსალინისა (1) და 1,1,3,8,10,10-ჰექსამეთილ-2,9-დიმეთილიდენინდოლინო[4,5-e]ინდოლინის (2) აზომეულლების რეაქციები ფენილ-, პ-ბრომ-, პ-ნიტრო- და პ-სულფამიდ-ფენილდიაზონიუმის ქლორიდებთან პოტენციური ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების მიღების მიზნით. აზომეულლების რეაქციები ჩატარებულ იქნა ნაერთების 1, 2 და ფენილდიაზონიუმის მარილების ურთიერთქმედებით ჩაუნაცვლებელ ბენზოპიროლოინდოლში აზომეულლების ანალოგიური მეთოდით, შემდეგი სქემების მიხედვით.

აზომეულლება ჩატარებულ იქნა წყალი-დიოქსანის ხსნარში (pH 7). ფომერის ფუძეებზე 1, 2 შესაბამისი ფენილდიაზონიუმის მარილების ჭარბი რაოდენობის დამატება ხდება -3-5°C-ზე მუდმივი მორევის პირობებში. რეაქციის პირველ საფეხურზე წარმოქმნილი დიჰიდრაზონები, გამოყოფის გარეშე, ტუტით დამუშავების შედეგად გადაყვანილ იქნა შესაბამის დიაზონაერთებში **3-8**. აზომეულლების რეაქციის პროდუქტები გამოყოფილ იქნა შეფერილი ფხვნილების სახით. ნაერთთა სტრუქტურა დადგენილია სპექტრული მეთოდებით.



ფიშერის

ფუძეების ბის-ანალოგების აზომუელულების რეაქციების შედეგად, განსხვავებით ჩაუნაცვლებელი ჰეტეროციკლებისაგან, სინთეზირებულია შესაბამისი ბის-აზონაერთები **3-8**. ეს აიხსნება იმით, რომ ჩაუნაცვლებელ ჰეტეროციკლში ერთ პიროლის ბირთვში ფენილაზოჯგუფის ელექტრონო-აქცეპტორული გავლენა იწვევს პიროლის მეორე ბირთვის შედარებით ინაქტივაციას და მასში მეორე აზოჯგუფის ელექტროფილური ჩანაცვლება გამძლეებულია. ხოლო ფიშერის ფუძის ბისანალოგებში **1**, **2**, შეუღლებული სისტემის არარსებობის გამო ფენილაზოჯგუფის ელექტრონულ-აქცეპტორული ეფექტი არ გადაეცემა მეთილიდენის მეორე ჯგუფს და შესაბამისად, ადგილი აქვს ელექტოფილურ ჩანაცვლებას ორივე მეთილიდენურ ჯგუფში.

### ლიტერატურა:

1. Самсония Ш.А., Трапаидзе М.В., Курковская Л.Н., Третьякова Л.Г., Ефимова Т.К., Суворов Н.Н. *Химия Гетероцикл. Соедин.*, 1979, №9, с. 1221-1227.
2. Самсония Ш.А., Трапаидзе М.В., Долидзе С.В., Эсакия Н.А., Курковская Л.Н., Суворов Н.Н. *Химия Гетероцикл. Соедин.*, 1988, №9, с. 1205-1212.
3. Самсония Ш.А., Трапаидзе М.В., Купрашвили Н.А., Мамаладзе Л.М., Суворов Н.Н. *Пирролоиндолы. 13. Химия Гетероцикл. Соедин.*, 1988, №5, с. 603-607.



нитробензойная кислота (7) была получена нитрованием анилида (1) нитрующей смесью ( $\text{HNO}_3:\text{H}_2\text{SO}_4$ ), а 4-алкокси-2-нитро-N-адамантоиланилиды (8,9) нитрованием азотной кислотой (56%) в уксусной кислоте. Каталитическим восстановлением последних в среде этилацетата в присутствии никеля Реня получены соответствующие аминопроизводные, циклизацией соединений (10,11) - бензимидазолы (12-13).

#### **Литература:**

1. Морозов И.С., Петров В.И., Сергеева С.А. Фармакология адамантанов. Волгоградская медицинская академия, Волгоград. 2001, 320с.
2. Ковтун В.Ю., Плахотник В.М. *Хим.-Фарм. журнал*, 1987, т.28, №8, с.931-940
3. Ковалев И.Е. *Хим.-Фарм. журнал*, 1977, № 3, с. 19-27
4. Зурабшвили Д.С., Ломидзе М.О., Самсония Ш.А., Веквет А.О., Кацмайер У. *ХГС*, 2008, №8, с.1172-1182. (*Chem. Heterocycl. Comp.*, Vol. 44, N.8, 2008, pp. 941-949)
5. Zurabishvili D.S., Lomidze M.O., Trapaidze M.V., Samsoniya Sh.A. *Nova Science Publishers*, 2010, pp. 47-98.

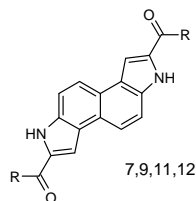
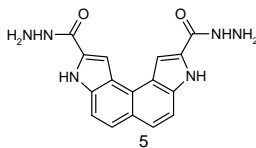
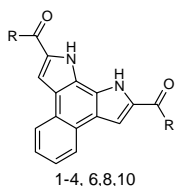
**Благодарность:** Данный проект осуществлен при финансовой поддержке национального научного фонда Грузии (*Грант № GNSF/STO8 /4-413*). Любая мысль, изложенная в данной публикации принадлежит авторам. Выражаем благодарность службе академического обмена Германии (DAAD) за поддержку сотрудничества и программы обмена между Тбилисским государственным университетом им. Иване Джавахишвили и университетом Саарланда (Германия).

## დიჰიროლონაფთალინების ამიდური ნაწარმების მას-სპექტრებში ფრაგმენტაციის თანხმობები

ნ. ნიკოლეიშვილი\*, მ. ტრაპაძე, ნ. კუპრაშვილი, ნ. ესაკია,  
დ. ზურაბიშვილი, შ. სამსონია

ივ. ჯავახიშვილის სახ. თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ქიმიის  
დეპარტამენტი, ვ.ი.ჭავჭავაძის გამზ., თბილისი, საქართველო,  
nionikolau@yahoo.com

ნაშრომში წარმოდგენილია ჩვენს მიერ ადრე სინთეზირებული ბენზოპიროლოინდოლის დიქლორანჰიდრიდისა 1 და მის საფუძველზე მიღებული დიამიდების 2,3,4 მას-სპექტრების ანალიზი [1]. ეს მონაცემები შედარებულია ჩვენს მიერ შემდგომში სინთეზირებული იზომერული დიჰიდრაზიდებისა 5,6,7 და მათ საფუძველზე მიღებული ჰიდრაზიდოჰიდრაზონების 8-12 მას-სპექტრებთან [2].

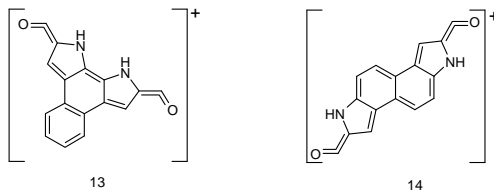


1 R = -Cl; 2 R = -NH-Ph; 3R= -NH-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>- Cl(p) ; 4 R = -N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> ; 6,7 R = -NH-NH<sub>2</sub> ;

8,9 R = -NH-N=C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> ; 10, 11 R = -NH-N=C(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub> ; 12 R = -NH-N=C(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-Ad

ნაერთების 1-12 მას-სპექტრების შედარებისას დადგენილია დიჰიროლონაფთალინების ამიდური ნაწარმების მოლეკულური იონების ფრაგმენტაციის ზოგადი სქემა, რომლის თანახმად, საწყის სტადიებზე ხდება რადიკალების (R) თანდათანობითი ელიმინირება და დიკარბონილის ჯგუფის შემცველი ფრაგმენტის წარმოქმნა შესაბამისი მასებით m/z =259 ან m/z =258, რომლებიც მას-სპექტრებში დაფიქსირებულია ან მაქსიმალური (100 %), ან მაღალი ინტენსიურობის პიკების სახით [OC-HeT-CO]<sup>+</sup>. ამ საერთო ფრაგმენტული m/z =259 იონისათვის ჩვენს მიერ წარმოდგენილია

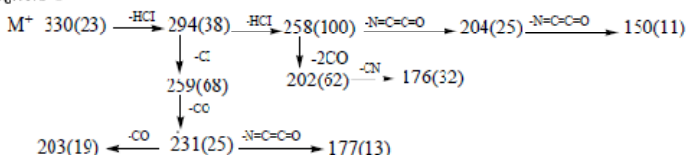
ქინოიდური აგებულების ორი იზომერული სტრუქტურა 13, 14, რომელიც სავარაუდოდ მათ მდგრადობას განაპირობებს:



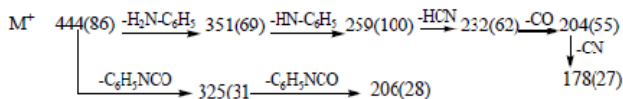
ამ იონების შემდგომი ფრაგმენტაცია მიმდინარეობს ძირითადად HCN და CO ჯგუფების თანდათანობით მოხლეჩვით. ზოგიერთ შემთხვევაში კი დაფიქსირებულია მისი დაშლის საინტერესო ალტერნატიული გზაც, რომელიც მნიშვნელოვნად განსხვავდება ინდოლების დაშლის ცნობილი სქემისაგან - სპექტრებში ფიქსირდება  $-N=C=O$  ფრაგმენტის ელიმინირება (პიროლის ბირთვის დაშლა).

ქვემოთ მოყვანილია მოლეკულური იონების დაშლის სქემები, სპექტრებში ყველა პიკის გათვალისწინებით:

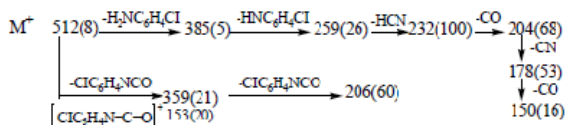
ნაერთი 1



ნაერთი 2



ნაერთი 3







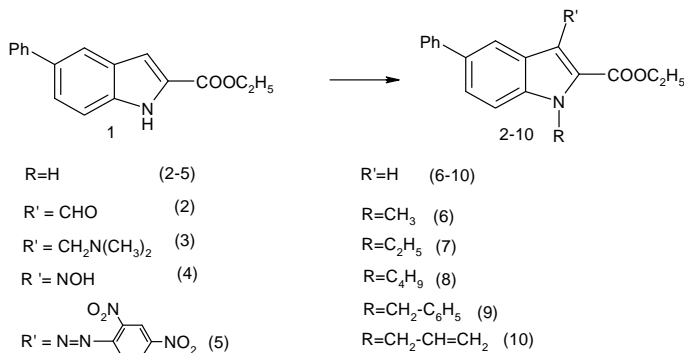
## INVESTIGATION IN THE FIELD OF 2-ETHOXYCARBONYL-5-PHENYLINDOLE

N. Barbakadze\*, Sh. Samsoniya, I. Chikvaidze, Sh. Oboladze

*Iv. Javakhishvili Tbilisi State University  
I. Chavchavadze Ave. 3, Tbilisi, Georgia  
nana\_barbakadze@yahoo.com*

Indole or indole containing systems, which contain  $\beta$ -carbonyl atoms, are interesting objects of study to obtain the aryl analogues of important biologically active natural or synthetic compounds. Interesting scientific data were obtained to study the chemical properties of these types of compounds [1-3]. It is important to note that results of biological and pharmacological studies of new indole containing compounds, which were obtained in this way [4-6].

In the present paper we undertake a detailed study the chemical properties of 2-ethoxycarbonyl-5-phenylindole using electrophilic substitution reactions (scheme 1). In order to obtain compounds having potential physiologically active properties were carried out reactions of condensation of 3-phormyl derivative of 2-ethoxycarbonyl-5-phenylindole with compounds having amino-function (scheme 2). The influence of substituent groups on this reactions was established.

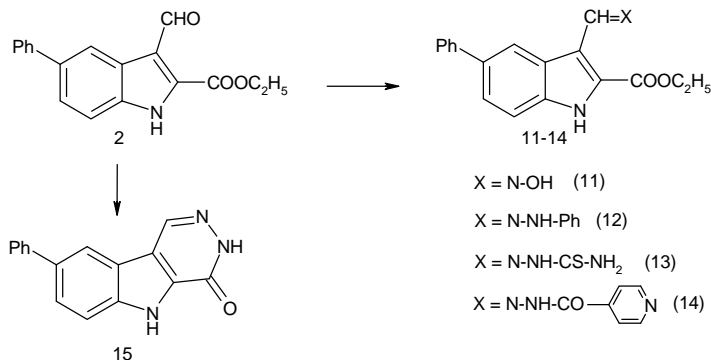


**Scheme 1.**

Due to the existence of electronacceptor esteric group in the molecule of indole (1) provides conditions of the reactions of formylation, dimethylaminomethylation and nitrosation comparative at high temperature. The mentioned group opposes the diazonium cation. Therefore of azo-coupling reaction was carried out by

nontraditional methods – under the condition interphase catalysis. Condensation reactions also were going at high temperature. Influence of 5-phenyl group on the mentioned reactions was insignificant.

On the base  $\beta$ -formyl derivative of 2-ethoxycarbonyl-5-phenylindole were synthesized new potential intercalator – new 8-phenyl derivative of pyridazinoindoles (15) (scheme 2).



**Scheme 2**

The structures of synthesized compounds were established by spectral methods.

#### References:

1. Pathak V. N., Meenakshii ; Anjali, T., Rupadevi S. *International Journal of Pure & Applied Chemistry*, 2007, 2, 245-253.
2. Semenov B. B., Iurovskaia M. A. Preparation chemistry of gramines. Moscow: Sputnik, 2005, p. 184.
3. Avramenko B. G., Nazina V. D., Suvorov N. N. *Chemistry of heterocyclic compounds*, 1970, 8, 1071-1075.
4. Angerer V. F., Prekajac J., Strohmeier J. *J. Med. Chem.*, 1984, 27, 1439-1447.
5. Avramenko V. G., Pershin G. N., Nazina V. D., Zikova T. N., Sarma P. K. Sergeeva J. F., Rusanova L. B., Suvorov N. N. *J. Chim. Pharm.* 1974, 8, 4, 10-13.
6. Drugs of the future. 1985, 10, 12, 1029.

**Acknowledgments.** The designated project has been fulfilled by financial support of the Georgia National Science Foundation (Grant #GNSF/ST07/4-181). Any idea in this publication is possessed by the author and may not represent the opinion of the Georgia National Science Foundation itself.

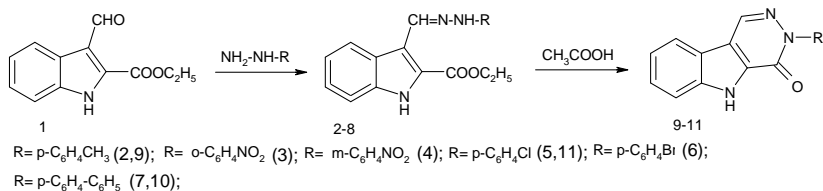
## SYNTHESIS OF NEW POLYNUCLEAR NITROGEN CONTAINING HETEROCYCLIC SYSTEMS

**A. Kalatozishvili\*, Sh. Samsoniya, N. Targamadze,  
I. Chikvaidze**

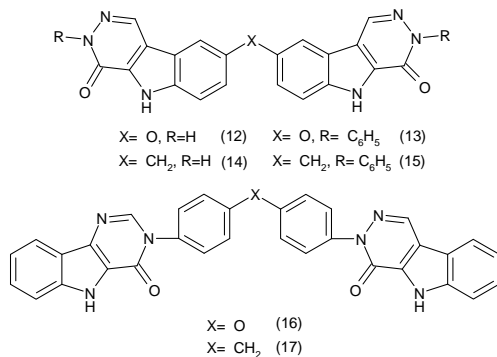
*Iv. Javakhishvili Tbilisi State University, I. Chavchavadze Ave. 3, Tbilisi, Georgia  
kako\_kala@yahoo.com*

Pyrridazinoindole- azaanalogue of  $\beta$ -carboline, the ring of which is the basis of wide variety of substances with high physiological activity, have attracted attention of researchers in recent years [1]. Many derivatives of isomeric pyrridazinoindoles reveal high biological activity [2-4], while others were identified as effective intercalators of DNA [5].

3-aryl-4-oxo-pyridazino[4,5-b]indoles were carried out according to the following scheme:



Simetric isomeric bis-tricyclic systems were carried out analogue:



**References:**

1. R. Barton and U. Olisa, General Organic Chemistry, M.: Khimia, 1985, v.8.
2. Velezheva V.C., Brennan P.J., Marshakov V.Yu. and ets. *J. Med. Chem.*, 2004,47, 13, 3455-3461.
3. Ferzaz B., Braukt E., Bourkiaud G. and ets. *J. Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 2002, 301, 3, 1067-1078.
4. Campagna f., Palluoto F., Mascia M.P. *Farmaco*, 2003, 58, 129-140.
5. A.Molina, J.J. Vaquero, J. G. Garcia-Navio, I. Alvarez-Builla, B. de Pascual-Teresa, F. Gago, M. M. Rodrigo, *J. Org. Chem.*, 1999, 64, 3907.

**Acknowledgments.** The designated project has been fulfilled by financial support of the Georgia National Science Foundation (Grant #GNSF/ST07/4-181). Any idea in this publication is possessed by the author and may not represent the opinion of the Georgia National Science Foundation itself.

## NUTRITIONAL AND MEDICAL NATURE OF OAK ACETUM

**N. Memarnishvili, N. Shavliashvili, T. Ivalishvili,  
T. Tsivtsivadze, R. Skhiladze, N. Chigogidze**

*Georgian Technical University  
ninucaa@live.com*

As a result of purposeful and measurable creative scientific-research works provided by particular group of scientists of Scientific Center of Biologically Active Substances under Technical University of Georgia, they processed original way of preparing curative oak acetum:

**1) Stage of anaerobic digestion.** By adding sugar, water and wine ferment of necessary quantity to the natural juice of grapes, apple, pear and quince together with mash, under the temperature  $t\ 23\pm 3\ ^\circ\text{C}$  by anaerobic (oxygen free) digestion we receive liquid similar to the fruit wine, with concentrated alcohol (9+12% in the given  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ). Alcohol concentration depends on existence of saccharin (not less than 20÷24 %) in the substance. Duration of anaerobic ferment is 10-12 days in the sunlight proof premises. Sunlight prevents boiling. After finishing of anaerobic digestion, they separate liquid with alcohol concentration from sediment and prepare it for aerobic digestion.

**2) Stage of aerobic digestion.** During aerobic (Oxygen concentrated) digestion they transfer liquid with alcohol concentration to the container of systemic aeration of oxygen. Acetic acid seething is supported by the large contact surface with air and more permanent temperature, about  $20\ ^\circ\text{C}$ , as well as dark container. Acetic acid seething is finished during 40÷60 days, when the liquid smoothes down and becomes transparent. Later it is moved to the stage of fermentation on the oak shavings.

**3) Stage of acetum fermentation.** The liquid of acetic acid of up to 7 %, of remaining organic aids from 1.5 up to 2.0 % (of amber, wine, fumarin, apple, lemon, glycol, milk, glycerin, gluco and so on as well as small quantity of adipose and redolent acids); with concentration of nitrogenous substances, high spirits, complex esters with content of mineral substances, are moved to enameled cisterns for fermentation on oak shavings. Pre-treated oak shaving is spread on stockpile, calculating  $1000\div 1200\ \text{cm}^2$  of the surface of oak shavings on one decalitre of acetum. Optimal temperature of fermentation is  $20\div 25\ ^\circ\text{C}$ , not less than during 6 months from the moment of putting oak shavings into it. Accelerated

method of fermentation during 50÷60 days is allowable as well, while thermal processing during interval of 35÷45°C in the enameled reservoir. During fermentation period oak acetum is saturated with oxygen up to concentration of 20 mg/dm<sup>3</sup>.

Contact of oak shavings and acetum essentially changes its chemical concentration (see table 1), physical-chemical index, as well as smell and medical nature. Acetum is significantly enriched with phenol compounds, which take active part in formation of sensor features of acetum, and play role of antioxidant, have antibacterial, antimycotic worth. Phenol compounds also participate in the reaction of oxidation and restoration with nitrogenous compounds and aldehydes, form complexes with protein substance.

Phenol compounds, as biologically active substances, increase curative features of oak acetum significantly when being in chemical concentration of it. The former is the best dietary means.

Usage:

- To remove oppression of varicose veins they spray oak acetum to the veins and knead it at night and in the morning. After about one month, veins are compressed. Direction of use: they take two teaspoons of oak acetum on one cup of water two times a day.
- To cure sting of insects: removes sharp pain caused by sting of insects and painful sensation on the stung areas by lubricating oak acetum on them.
- In case of infringement of food digestion they take oak acetum for the purpose of ventricle activation; inhibition of development of pathogenic micro flora in guts.
- Taking oak acetum to support burning proteins and reducing weight.
- Treatment of burns.

Processing of the burnt skin on the body by undiluted oak acetum shall remove sharp pain and common sense of pain.

## **THE INFLUENCE OF POTASSIUM FERROCYANIDE ON TOTAL PHENOLS AND IRON OF WINE**

**Kh. Mamaishvili\*, M. Khomasuridze**

*Georgian Technical University, 77, kostava str. Tbilisi, Georgia  
xato\_13@mail.ru*

According to the established standard, iron concentration in wine must not exaggerate to 10 mg per liter. If the proper chemical analyse confirms that iron content in wine is higher, a wine maker must reduce this parameter.

Trace iron concentrations in wine are beneficial for enzyme activity, as a stabilizer, and as a functional component for proteins. At higher concentrations it alters the redox potential, in favoring oxidation, affecting sensory characteristics and participating in the formation of complexes with tannin and phosphates resulting in instabilities (casse). The most common iron case is "white casse" (iron phosphate), it is initially seen as milky white cloud and later as a precipitate. The "blue casse" (ferric tannate) that occurs less often can be observed in white wines, for example, after tannic acid additions. Most of the iron present in wine is present in the ferrous Fe(II) state. The ratio of the Fe(II)/Fe(III) depends on the oxidation state of wine. If Fe (III) is formed, it can bind with phosphates that are normally present in wine.

The usage of Potassium ferrocyanide for this purpose is allowed by „Georgian Law About Wine and Vine.”

Potassium ferrocyanide, also known as yellow prussiate of potash or potassium hexacyanidoferrate (II), is a coordination compound of formula  $K_4[Fe(CN)_6] \cdot 3H_2O$ , which forms lemon-yellow monoclinic crystals at room temperature.

The experiment was arranged to evaluate the influence of potassium ferrocyanide on phenol and polyphenol compounds after wine purification. Polyphenols have been found to have antioxidant properties. Antioxidants are substances that protect cells from oxidative damage caused by molecules called free radicals. So wine maker must maintenance stable total phenols in order to produce the nutrient, high quality wine.

Wine analyses for iron determination were conducted according to standard methods.

On the first stage of experiment we determined the average and necessary dosage for the trial 5 g/hl [1]. We have reduced the iron concentration from 18 mg/l to 6 mg/l.

Investigation object examined on polysaccharide, poliphenolic, metal, albiminous and invertible colloidal turbidity It was stabile only against albiminous and polysaccharide turbidity and had on evident invertible colloidal, metal and poliphenolic turbidity [2].

For the perfect precipitation blue "Prusse" and wine stabilization, based on the approbate experimental clarification process and the recommendation of institutes of Oenology of Champagne there was worked out the scheme of wine purification. After the 6 hours from the treatment with PF we have added in wine tank the optimal dosage of Gelatin and Bentonite suspension,- Gel Plus ( 15-30 g/hl.)

After 8 days wine was racked from lay lees, filtered and examined on the problematic turbidities. Wine was stable and residual iron was 6 mg/l.

We applied the Folin-Ciocalteu spectrophotometric method for determination of total phenols. Analyses were performed according to Compendium of International Methods of wine and must Analyses (International Organization of Wine and Vine). [3].

Obtained results from conducted analyses confirmed that the above mentioned technological process reduces not only iron content but also total phenols from 1566 to 1188 mg/l.

## **References**

1. Meredith M. K., Baldwin S., Andreasen A. A. Determination of iron in alcoholic beverages. 1970, pp 12-16.
2. Compendium of International Methods of wine and must Analyses (International Organization Of wine and Vine). HPLC-Determination Of Nine Major Anthocyanins In Red And Rose Wines, volume 2, Section 3.15, (ed 2003).
3. Compendium of International Methods of wine and must Analyses (International Organization Of wine and Vine). Folin-Ciocalteu Index, volume 1, Section 2, (ed. 2003).



## **THE STABILITY OF NANOSIZED SILVER IN AQUEOUS MEDIA**

**M. Kikalishvili, M. Donadze**

*Georgian Technical University, 77 Kostava Str., 0175 Tbilisi, Georgia  
marikikala@gmail.ge*

Nanoparticles (NPs) - particles with the dimensions of 1-100 nm are characterized by high specific surface area. Decrease in particle size to nanometer scale results in a dramatic increase in surface to volume ratio and increase in excess surface energy. These provides base for unique chemical and biological properties of nanosized silver. However, owing to the same effects silver NPs loose its stability and undergo aggregation and corrosion. To prevent these undesirable effects the capping agents, stabilizing silver NPs introduced in the electrosynthesis process. It is common to use amphiphilic substances as capping agents, exploiting their ability to anchor metal NPs by polar end of the molecule, while the other - hydrocarbon end is strongly solvated by organic solvent, providing formation of a protective hydrophobic shell. We studied the stability of silver core – oleic acid shell systems in an aqueous media as well as the regularities of unwilling processes (corrosion, aggregation) which accompanies desorption of capping agent from the surface of silver NPs.

## **ON THE ESSENCE OF INORGANIC COMPONENT PART OF PKHOVELI PELOID**

**L. Ebanoidze, N. Bokuchava, A.Sarukhanishvili**

*Department of Chemical technology, Georgian Technical University, 77,  
Kostava str., Tbilisi, 0175, Georgia,  
ebanoidzelika@rambler.ru*

Georgia is distinguished by location, diversity and quantity of peloids. For their estimation is necessary to determine the essence of both organic and inorganic component parts of these peloids.

One of the representatives of peloids is Pkhoveli deposit, which is less studied in comparison with other peloids.

The presented work is devoted to the determination of inorganic component part of peloid from mentioned location. Both theoretical and experimental methods have been used: among theoretical ones – petrochemical method of peloids' oxide content on conversion to normative minerals; while from experimental methods – the methods of derivatography, diffractography, IR spectroscopy, crystal optics study.

The research shows that Pkhoveli peloid is basically represented by water-containing aluminosilicates, or else by compounds, which belong to sheet silicates according to their crystal-chemical classification. As a result of research has been defined, that basis mass is minerals of Montmorillonite-Beidelite group  $(Ca,Na)_{0,35}x(Al,Mg,Fe)_2[(Si,Al)_4O_{10}](OH)_2 \cdot H_2O + (Ca,Na)_{0,3}xAl_2[[Al,Si]_4O_4](OH)_2 \cdot 4H_2O$ , while among anhydrous silicates: feldspar, quartz, calcite (tiff) (see Table 1).

Minerals' conventional notations: Albite – Ab; Anortite – An; Beidelite (Bei); Glauconite – Gl; Calcite – Cc; Caolinite – Kt; Quartz – Q; Montmorillonite – Mt; Orthoclase – Or; Pyrite – P.

Table 1. Oxide composition of minerals

Oxides	Quantity			Minerals									
	Mass. %	Number of moles	Pyrite (P)	Monmorillonite (Mu)	Bekelite (Be)	Glauconite (Gl)	Kaolinite (Kl)	Anatite (An)	Orthoclase (Or)	Albite (Alb)	Quartz (Q)	Calcite (Cc)	The rest
TiO <sub>2</sub>	0.78	0.0097		0.0097									
SiO <sub>2</sub>	52.50	0.8654		0.1383	0.1400	0.0683	0.0006	0.0200	0.0132	0.2382	0.2468		
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	16.2	0.1589		0.0414	0.0422	0.0231	0.0003	0.0100	0.0022	0.0397			
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.42	0.0214		0.0136	0.0078								
FeO	1.16	0.0161	0.0081			0.0080							
CaO	2.90	0.1052		0.003	0.0029			0.0100				0.0896	
MgO	1.65	0.0409		0.0409									
Na <sub>2</sub> O	4.30	0.0693		0.0125	0.0091	0.0080				0.0397			
K <sub>2</sub> O	2.10	0.0222				0.0200			0.0022				
SO <sub>3</sub>	1.29	0.0161	0.0161										
H <sub>2</sub> O*	2.41	0.1358		0.0729	0.0411	0.0212	0.0003						
H <sub>2</sub> O*	4.24	0.2455		0.1227	0.1228								
CO <sub>2</sub>	4.02	0.0914					0.0012				0.0896	0.0018	
FeS <sub>2</sub>			0.0081										
O <sub>2</sub>			0.0161										
	100.0	1.7979		0.4550	0.1486		0.0400	0.0176	0.3176	0.2468	0.0792	0.0018	1.7979

References:

1. Nana Bokuchava. Georgian peloids. Thesis work. Georgian Technical University, 2002, 202 p.
2. V.E. Treger. Optical determination of rock-forming minerals. M., Nedra, 1968, 98p.
3. L. Berry, B. Mason, R. Ditrich. Mineralogy. M, Mir, 1987, 592p.
4. G. Feklichev. Diagnostic spectrum of minerals. M. Nedra, 1977, 288p.
5. Mineralogical encyclopedia. Under the editorship of K. Frey. M. Nedra, 1985, 512p.
6. V.A. Fank-Kamenetsky. The nature of structural admixtures in minerals. L. LU, 1964, 140p.

## **SELECTION OF MICROBIAL CAROTENOIDS**

**L. Mosiashvili, M. Siradze, I. Berdzenishvili**

*Department of Chemical Technology, Georgian Technical University,  
77 Kostava str., Tbilisi, 0175, Georgia  
i\_berdzenishvili@gtu.ge*

Observation on wide distribution of carotenoids in vegetable and animal worlds, their diversification showed that during the whole process of evolution vegetables and micro organisms accumulate carotenoids, while human beings and animals use them with food. It is stated that besides provitamin activity carotenoids are characterized with anti-oxidant, anti-carcinogenic, anti-mutagenic and immune stimulating properties. Therefore, at present one of the important problems of contemporary pharmaceutical science is the creation of prophylactic and medical means on the bases of carotenoids. In the case of increased demand for carotene preparations the detection of its natural resources is very important. The shortcoming of preparation of carotene from vegetable raw material is its deficiency because of low carotene contents in it, and its accumulation depends on natural climatic conditions and the control of this process is very complicated. At present the receipt of carotene by micro biological synthesis (bacteria, yeasts, fungi and water plants) is of prime priority.

The purpose of the mentioned (our) research was screening of yeasts separated from different climate zones of Georgia of biologically active matter – carotene for quantitative content. The yeasts in soil samples of Kakheti, Kartli, Imereti and Racha regions [1] have been studied. Yeast separation and identification was done in Zakharov solid synthetic food area and on grapes juice area [2]. From separated 62 pure cultures (one colony – one cell) 15 carotene synthesizing yeast strains were visually chosen, which by morpho-physiological and cultural-biochemical signs belong to *Rhodotorula* genus. The major parameters of carotene extraction from cells were estimated. Carotene extraction was done with grinding of acetone and alcohol mixture in ground glass. The received mass was passed through No 4 quartz filter in vacuum. For quantitative determination of carotene the suspension was measured with spectrophotometer at 453 nm. The received data were compared with calibration curve built according potassium dichromate. It is accepted that 0.036% potassium dichromate solution in coloring corresponds to 0.00208 mg carotene in 1 mg solvent. General quantity of carotene in the studied yeasts

corresponds to 2-4 mg/g recalculated to dry mass. Such composition of food area is elaborated which, on the one hand, is cheap and, on the other hand, will increase biomass yield in yeasts and stimulate carotenogenesis. Qualitative content of carotenoids is studied by method of thin layer chromatography.

**REFERENCIS:**

1. Fomin G.S. Fomin A.G. Quality control and environmental safety according to international standards. – M.: Protector, 2001. – 300 p.
2. Zakharov I.A., Kozhin S.A., Kozhin T.A. and other. Collection methods on the genetics of the yeast *Saccharomyces*. L.: Nauka, 1984. – 144 pp.

## **THE EFFECT OF SUPERPLASTIFIERS' ADDITIONS ON CEMENT AND CONCRETE PROPERTIES**

**N. Karkusashvili\*, T. Suladze**

*Department of chemical technology, Georgian Technical University,  
77 Kostava str., Tbilisi, 0153, Georgia*

As it is known, cement and concrete strength is directly depended on the quantity of added water (with ratio of water/cement) because of a lot of factors (carrying distance, duration of concreting process and preservation of good fluidity during this period, ambient temperature etc.). The constructor is forced to significantly raise the ratio of water/cement that reduces concrete strength, increases porosity (void content), shrinkage, reduces freezing tolerance etc. That's why, in order to use cement potential to the maximum we should try to reduce additional amount of water without deterioration of its basic properties (mobility, flowability).

The process of setting is quiet important, and especially the durability of its first period (from water pouring to the beginning of setting), when water-cement system is characterized by thixotropic ability, i.e. the ability of destroyed structure's restoration without deterioration of its properties. For this purpose so-called superplastifiers are very effectively used in concretes lately – the substances heavy increasing concrete fluidity along with significant reduction of water-cement ratio. As a result we receive the concrete of substantively high quality, but their effect on cements properties virtually is not studied.

The work objective is to study the effect of superplastifiers' addition both in cements and in concretes.

The study of superplastifier MR-50-N addition quantity's effect on the various types of cements and concretes is represented in this work.

It is established, that the effect of superplastifiers on such properties as setting duration and mobility are, is more effectively revealed in concretes. The opinion is expressed that this fact is stipulated by structural differences between cement and concrete.

## მდ. არაგვის ფსკერული ანალიზის შედეგები

თ. შარაშიძე, ლ. გვერდწითელი

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

მდინარეების ფსკერული ნალექები ფორმირდება წყალშემკვრები აუზის ამგები ქანების და ნიადაგური საფარის გამოფიტვის, ასევე შეწონილი ნივთიერებების ბუნებრივი სედიმენტაციის შედეგად. ფსკერული ნალექების ქიმიური შემადგენლობა კანონზომიერად იცვლება მდინარეთა აუზის საშუალო სიმაღლის, ამგები ქანების ლითოლოგიისა და გრანულომეტრული შემადგენლობის მიხედვით [1].

სხვადასხვა კვლევების თანახმად, ინდუსტრიულ რაიონებში მდინარეების მძიმე მეტალებით დაბინძურების 55% გამომდინარეობს ანტროპოგენულ დაბინძურებით (სამთო-მომპოვებელი, მეტალურგიული, გალვანური, ქიმიური წარმოებები, პესტიციდები და ა.შ.)

2010 წლის ივნისის თვეში აღებულ და გამოკვლეულ იქნა მთიულეთის და ფშავის არაგვის ფსკერული ნალექების შემადგენლობა. ანალიზის შედეგებიდან (ცხრილი 1) ჩანს, რომ მძიმე მეტალების შემცველობა არის კლარკზე ნაკლები, ანუ ფსკერული ნალექების შემცველობებით თუ ვიმსჯელებთ, ის პრაქტიკულად არ არსებობს, მიღებული შედეგი წარმოადგენს ბუნებრივ ფონს [2].

ცხრილი 1. ფსკერული ანალიზის შედეგები

ნიმუშის დასახელება, მგ/კგ	ფშავის არაგვი სოფ. თვალცი	მთიულეთის არაგვი სოფ. ანანური
Cd	<2.5	3.5
Pb	<25	<25
Zn	80	62.5
Cu	42	22
Ni	50	55
Mn	810	655
As	13.8	8.8

### ლიტერატურა:

1. Сунпаташвили Г.Д. кн: Гидрохимия Грузии (Пресные воды) Изд. Тбилисского университета. Тбилиси, 2003. Ст. 1 – 399 .
2. Гусер Т.В., Макаров С.В., Хачатуров А.Е., Хомулева М.В. Цевелев В.Н.- Гидрохимические показатели состояния окружающей среды. Справочные материалы. Эколайн 2000. ст. 154.

## INFLUENCE OF NATURAL AND ANTHROPOGENIC FACTORS ON NITRATE AND NITRITE IONS IN TRANSBOUNDARY RIVER KURA "MTKVARI" WATER IN TBILISI CITY AREA

L. Mtsariashvili

Department of Material Research, Iv. Javakhishvili Tbilisi State University, 13  
Chavchavadze Av., 0179, Tbilisi, Georgia  
mtsariashvili2005@yahoo.com

In the given work statistical processing of the existing base of long-term historical data of the River Kura «Mtkvari» water quality parameters (some biogenic substances: nitrate  $\text{NO}_3^-$ , nitrite  $\text{NO}_2^-$  and also ammonium  $\text{NH}_4^+$  ions) for the period of 1980 – 1989 in Tbilisi city is carried out.

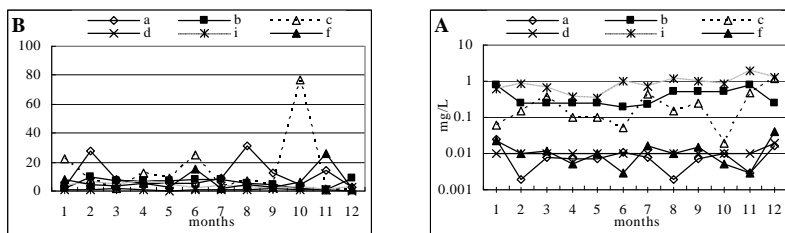
According to the methodology described in works [1,2], use of these data gives the chance to estimate quantitatively influence of natural and anthropogenic factors on corresponding parameters of water quality. There is offered the simple methodology of a quantitative estimation of these parameters of water quality, in particular, their equilibrium (background) values, influence of natural and anthropogenic factors on them, their extreme values are sufficient.

For characterization of background parameters of water quality in corresponding geographical area, available historical results for the control points located above the given settlement were used. For an estimation of anthropogenic "impact" the data for located below cities of control points were used. For investigated ions were defined: 1. background monthly value ( $B^n$ ) - minimum from all available sizes for the given period (in the given work, as a rule, 10 values, which have been received for the corresponding month, were used); 2. average "anthropogenic" value of parameter ( $B^{anth}_{av}$ ) - characterises influence of the factor of anthropogenic impact in normal (equilibrium) conditions (These values were calculated by subtraction of background values from the really measured results).

Average values of concentration factor  $K_k = B^{anth}_{ave}/B^n$ , depending on a month and also their average (annual) sizes depending on control point [2,3], were calculated. Background values ( $B^n$ ) and average "anthropogenic" sizes ( $B^{anth}_{av}$ ) for the biogenic substances - ( $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$ ) depending on a month for c. Tbilisi are resulted in figure.



Apparently, from the received data character of monthly (seasonal) dependence of background sizes has some decrease during the summer period and increase in winter – that can be connected with the natural reasons. As is marked, for example, in work [3], the content of biogenic elements in natural waters, first of all, nitrates is a consequence of formation and decomposition of organic substances as a result of photosynthesis processes. Usually their concentration is characterised by the minimum content during the vegetative period. Sometimes, for example, nitrates can be absent completely in water. In autumn the content of nitrates grows and reaches a maximum in winter period, when at its minimum consumption disintegration of organic substance and transition of nitrogen from organic forms into the mineral once is carried out. In spring with rise of temperature and day length increase starts again amplifying vital functions of plants and accordingly consumption of nitrates that has an impact on their concentration falling.



**Figure. Background (A) values (Bn) contents of the biogenic substances and average size of the contribution of the anthropogenic (B) factor (Banthav/Bn) for control point c. Tbilisi depending on month (1-January, 2-February, etc.) (a-  $\text{NO}_2^-$ ; b-  $\text{NO}_3^-$ ; c-  $\text{NH}_4^+$ )**

Time dependence observed in work is not so strongly expressed, that can be connected with rather warm environmental conditions of an arrangement of control point. In these regions strongly growth vegetative cover takes place. Their vegetative period is comparatively long, that creates conditions for longer period of photosynthesis, and therefore there always are nitrates and nitrites in water.

It is possible to note, that such approach appears perspective for the decision of many tasks arising at a quantitative estimation of various factors of influence of an environment on parameters of superficial water quality.

**Note.** The work has been executed within the framework of World Federation of Scientists Georgian Scholarship Programme, “Quantitative estimations of influence of environmental factors on water quality parameters (biogenic substances  $\text{NO}_2^-$ ,

NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, NH<sub>3</sub>, Total N, Total P) on the basis of the historical and modern data in area of some large settlements of the River Kura”, 2010.

**References:**

1. Kordzakhia G., Buachidze N., Azarashvili M., Kekelidze N., Jakhutashvili T., Chkhaidze M., Mtsariashvili L. *Georgia Chemical Journal*, 2006, Vol. 6, No. 4, pp. 474-478.
2. Kekelidze N., Jakhutashvili T., Chkhaidze M., Mtsariashvili L., Khikhadze N. *9<sup>th</sup> International Multidisciplinary Scientific Geo-Conference & EXPO SGEM 2009 – «Modern Management of Mine Producing, Geology and Environmental Protection»*, Albena Resort, Bulgaria, June 2009, pp.219-226
3. Alekin O.A., «Bases of hydrochemistry», Hydrometeorological publishing house, Leningrad, 1970

**CHROMATOGRAPHIC BEHAVIOR OF RISPERIDONE IN IONIC INTERACTION  
AND MICROEMULSION CHROMATOGRAPHIC SYSTEMS: STUDY OF  
PHARMACOKINETICS OF RISPERIDONE**

**N. Lominadze, M. Gvaramia, R. Chaladze, N.Kokiashvili, M. Alexishvili,  
M. Rukhadze\***

*Faculty of Exact and Natural Sciences, I. Javakishvili Tbilisi State University,  
University street 9, Tbilisi, 0128, Georgia  
marina.rukhadze@tsu.ge*

Risperidone is most important among atypical or the second-generation antipsychotic drugs. It is very effective in treatment of both the positive and the negative symptoms of schizophrenia. Risperidone is a benzisoxazole derivative and belongs to a chemically new class of drugs [1]. From the point of view of neuropharmacology risperidone represents antagonist of serotonin (5HT<sub>2</sub>) and dopamine (D<sub>2</sub>), also  $\alpha$ <sub>1</sub>-,  $\alpha$ <sub>2</sub>-adrenergic and H<sub>1</sub>-histaminergic receptors.

Selection of the optimum conditions for chromatographic elution and extraction from blood plasma are essential steps in the study of pharmacokinetics of risperidone. Construction of calibration plot and determination of the metrological parameters of the method are also necessary [2].

The microemulsion and ion interaction liquid chromatographic systems were used for the chromatographic determination of risperidone because of cationic nature of its molecule. The chromatographic behavior of risperidone by using of mobile phase modified with a nonionic surfactant polyoxyethylene cetyl ether (Brij-58) was investigated, an influence of concentration of Brij-58 and mobile phase pH on the retention factor of risperidone was studied. The chromatographic behavior of risperidone by using of mobile phase modified with an ion-pair reagent in combination with reversed phase C<sub>18</sub> stationary phase was also studied, influence of additives of triethylamine, concentration of buffer and amount of organic modifier on the retention and separation factor of risperidone and its internal standard azaleptine was investigated.

The chromatographic measurements were carried out with a micro-column liquid chromatography, "Milichrom-4". The chromatographic column was a Lichrospher-C<sub>18</sub> and Hema Bio Phenyl stainless steel column. Detection wavelength was 280 nm.

Hexane-isoamyl alcohol mixture and chloroform were used as extraction agents for liquid-liquid extraction of risperidone from blood serum. Influence of concentration of sodium hydroxide on extraction percentage of risperidone was investigated.

Pharmacokinetics of risperidone was studied in rabbits with weight 1.5 and 2.5 kg. Risperidone was administered in a single dose of 10 and 12 mg (4-6.7 mg/kg) to rabbits. The C<sub>plasma</sub>-t curves were constrained. The multiple peaks are observed on C<sub>plasma</sub>-t curves: the first C<sub>max</sub> is reached approximately in 1 hour, but the second one after 5-6 hours. The noncompartment as well as onecompartment models were used for calculation of pharmacokinetic parameters. The following data were obtained by using of noncompartment analysis:  $k_{el}=0.29\text{ h}^{-1}$ ,  $T_{1/2el}=2.4\text{ h}$ ,  $Cl=2.0-3.3\text{ L/h}$ ,  $V_{ss}=6.8-11.1\text{ L}$ . These values are in good correlation with data calculated by onecompartment model.

#### **References:**

1. Aravagiri M., Marder S. *Psychopharmacology*, 2002, 159:424-431.
2. Jones T., Breda K., Charles B., Dean A.J., McDermott B.M., Norris R. *Biomedical Chromatography*, 2009, 23:929-934.

## **ANALYSIS OF CHIRAL AMINO ACIDS IN CEREBROSPINAL FLUID SAMPLES LINKED TO DIFFERENT STAGES OF ALZHEIMER DISEASE**

**Sh. Samakashvili<sup>1\*</sup>, C. Ibáñez<sup>2</sup>, C. Simó<sup>2</sup>,  
F. J. Gil-Bea<sup>3</sup>, B. Winblad<sup>3</sup>, A. Cedazo-Mínguez<sup>3</sup>, A. Cifuentes<sup>2</sup>**

<sup>1\*</sup>*Department of Physical and Analytical Chemistry, School of Exact and Natural Sciences, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, 0179, Tbilisi, Georgia. E-mail: shorena\_samakashvili@yahoo.com*

<sup>2</sup>*Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CSIC), Nicolas Cabrera 9, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.*

<sup>3</sup>*NVS Department, KI-Alzheimer's Disease Research Center, Karolinska Institute, 14186 Stockholm, Sweden.*

In this work, chiral micellar electrokinetic chromatography with laser induced fluorescence detection (chiral-MEKC-LIF) is used to investigate the D- and L-amino acids content in cerebrospinal fluid (CSF) samples related to different Alzheimer disease (AD) stages. CSF samples were taken from control subjects (S1 pool, n=33 individuals), subjects showing a mild cognitive impairment (MCI) who remained stable (S2 pool, n=26 individuals), subjects showing a MCI that progressed to AD (S3 pool, n=13 individuals) and subjects diagnosed with AD (S4 pool, n=27 individuals). The optimized procedure only needs 10 µL of CSF and it includes sample cleaning, derivatization with FITC and chiral-MEKC-LIF separation in a background electrolyte composed of 100 mM sodium tetraborate, 80 mM SDS and 20 mM β-CD at pH 10.0. The majority amino acids usually found in CSF samples (namely, D- and L-forms of Arg, Lys, Leu, Gln, Ser, Ala, Glu and Asp together with the non-chiral amino acids gamma-aminobutyric acid (GABA) and Gly) were separated with efficiencies up to 703000 plates/m, high sensitivity (LODs in the nM range) and good resolution (values ranging from 2.6 to 9.5). Using this method, L-Arg, L-Leu, L-Gln, GABA, L-Ser, D-Ser, L-Ala, Gly, L-Lys, L-Glu and L-Asp were detected in all the CSF samples. S3 and S4 samples (i.e., AD subjects) showed significant lower amounts of L-Arg L-Lys, L-Glu and L-Asp compared to the non-Alzheimer S1 and S2 samples, showing the S4 group the lowest amounts of L-Arg L-Lys, L-Glu and L-Asp. Moreover, GABA was significantly higher in AD subjects with the highest amount also found for S4. No significant differences were observed for the rest of amino acids including D-Ser. Based on the obtained chiral-MEKC-LIF data, it was possible to correctly classify all the samples into the four groups. These results demonstrate that the use of enantioselective procedures as the one developed in this work can provide some

new light on the investigations of AD, including the discovery of new biomarkers related to different stages of AD.

### **Acknowledgements**

Sh.S. thanks Shota Rustaveli National Science Foundation for providing Grant for Young Scientists for this study (Project No. #04/03)

### **References:**

1. Fisher G., Lorenzo N., Abe H., Fujita E., H. Frey W., Emory C., Di Fiore M. M., and D'Aniello A. *Amino Acids*, 1998, 15, 263-269.
2. Degrell I., Hellsing K., Nagy E., and Niklasson F. *Arch. Gerontol. Geriatr.*, 1989, 9, 123-135.
3. D'Aniello A., Fisher G., Migliaccio N., Cammisa G., D'Aniello E., Spinelli P. *Neuroscience Letters*, 2005, 388, 49-53.
4. Fonteh A. N., Harrington R. J., Tsai A., Liao P., and Harrington M. G. *Amino Acids*, 2007, 32, 213-224.
5. Simo C., Barbas C., and Cifuentes A. *J. Agric. Food Chem.* 2002, 50, 5288-5293.

## **Helleborus caucasicus - კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა ნაწილებში და ფოთლებში სტეროიდული ნივთიერებათა დაბროვების დინამიკა**

**თ. მუზაშვილი**

*ივველ ქუთათელაძის ფარმაკოქიმიის ინსტიტუტი, 36 პ.  
სარაჯიშვილის ქ., თბილისი 0159, საქართველო*

საქართველოში ფართოდ გავრცელებული კავკასიის ენდემური სახეობა *Helleborus caucasicus* A.Br. – კავკასიური ხარისძირა მდიდარია სტეროიდებით [1], მცენარის მიწისქვეშა ნაწილებში მას-სპექტრული ანალიზით 20-მდე სტეროიდული ნივთიერების არსებობაა დადასტურებული. მათი ჯამის მრავალჯერადი სვეტური და პრეპარატული ქრომატოგრაფირებით 13 ინდივიდუალური სტეროიდი გამოყოფილი და დახასიათებული: ჰელებრინი, დეზგლუკოჰელებრინი, ჰელებრიგენინ-გლუკოზიდი, 20-ჰიდროქსიეკდიზონი და 9 პოლიჰიდროქსი და პოლიუნაჯერი ფუროსტანოლური საპონინი, რომელთაგან ოთხი - **კავკაზიკოზიდები A, B, C, D** ახალი ორგანული ნივთიერებებია [2].

კავკასიური ხარისძირას ფოთლების წილი მცენარის მთლიანი მასის 23-25%-ს შეადგენს. მას-სპექტრული ანალიზით მათში 30-ზე მეტი სტეროიდული ნივთიერების შემცველობა აღინიშნა. ფოთლებიდან ჰელებრიგენინი, 20-ჰიდროქსიეკდიზონი და ფუროსტანოლური გლიკოზიდებია იზოლირებული [3].

კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა და მიწისზედა ნაწილებში სტეროიდებთან ერთად სხვა ქიმიური კლასის ნაერთების – თიონინების თანაპოვნობა დადასტურებული.

მეორეული მეტაბოლიტების ბიოსინთეზი მცენარეებში ვეგეტაციის ფაზების მიხედვით გარკვეულ ცვლილებას განიცდის, და ცალკეული ქიმიური კლასების და მცენარეთა სახეობებისთვის სხვადასხვაგვარად მიმდინარეობს, ამიტომ აუცილებლობა მოითხოვს ყოველი კონკრეტული შემთხვევისთვის მათი დაგროვების დინამიკის შესწავლას.

წარმოდგენილ შრომაში მოყვანილია კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა ნაწილებში და ფოთლებში სტეროიდების დაგროვების დინამიკის

შესწავლის შედეგები. დაკვირვება წარმოებდა თბილისის მიდამოებში (სოფ. პატარა დიდგორი) ყოველი თვის 25-28 რიცხვში შეგროვილ ნედლეულზე.

სტეროიდული ნივთიერებების რაოდენობის განსაზღვრა ხდებოდა წონითი მეთოდით. 100 გ ჰაერმშრალი, დაწვრილმანებული ნედლეულის ექსტრაქცია ტარდებოდა 80% მეთანოლით გამხსნელის დუღილის ტემპერატურაზე 3-ჯერ 30 წთ-ის განმავლობაში (მიწისქვეშა ნაწილების შემთხვევაში წინასწარ წარმოებდა ნედლეულის ფორექსტრაქცია პეტროლეინის ეთერით სოქსლეტის ტიპის აპარატში). გაერთიანებული გამონაწვლილები იფილტრებოდა, გამხსნელის გამოხდის შემდეგ დარჩენილი ნაშთი შრებოდა ვაკუუმ-მაშრობ კარადაში 45 °C. სტეროიდების გამოსავალი გადაიანგარიშებოდა ნაშთის წონის მიხედვით აბსოლიტურად მშრალ ნედლეულზე.

**ცხრილი 1. კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა ნაწილებში და ფოთლებში სტეროიდული გლიკოზიდების ჯამის შემცველობა თვეების მიხედვით (აბსოლუტურად მშრალ ნედლეულზე გადაანგარიშებით)**

თვე 2009- 2010 წ.	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII
1. ფესვები და ფესურები	21	25	25	25	22	22	23	25	33	33	29	28
2. ფოთლები	24	23	25	32	20	18	19	20	25	24	25	25

ჩატარებულმა კვლევებმა აჩვენა, რომ კავკასიური ხარისძირას მიწისქვეშა ნაწილები სტეროიდული ნივთიერებების მაქსიმალურ რაოდენობას შეიცავს სექტემბერ-ოქტომბრის თვეებში, ხოლო ფოთლები აპრილში. მიღებული მონაცემები გათვალისწინებული უნდა იქნას ხარისხოვანი ნედლეულის დამზადების დროს.

### ლიტერატურა:

1. Далакишвили Ц.М., Кемертелидзе Э.П.. Фитохимическое исследование Морозника абхазского., Тб. „Мецниереба“, 1978, 88 с.
2. Bassarello C., Muzashvili T., Skhirtladze A., Kemertelidze E. et all. Steroidal glycosides from the underground parts of *Helleborus caucasicus*. Phytochemistry, 2008, 69, 1227-1233.



3. Музашвили Т.С., Кемертелидзе Э.П.. Стероидные вещества листьев *Helleborus caucasicus*. Химия природных соединений, 2009, 6, 771-772

\* წარმოდგენილი სამუშაო შესრულებულია შოთა რუსთაველის სახელობის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის ხელშეწყობით „პრეზიდენტის სამეცნიერო გრანტები ახალგაზრდა მეცნიერთათვის“ ფარგლებში

## **FEASIBILITY OF APPLICATION OF HYDROGEN FORM NATURAL MORDENITE IN THE PROCESS OF CLEANSING OF NITROUS GAS CONTAINING AIR**

**I. Rubashvili, K. Kordzakhia\***

*Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry, Jikia str.5,  
rubashvili@yahoo.fr*

*\*St.Andrew's University of the Patriarchate of Georgia*

The present paper deals with the study of the process of cleaning of air from nitrogen oxides (NO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O) by the use of natural zeolite – mordenite of Bolnisi-Ratevani origin (Georgia) in dynamic conditions on the specially construed laboratory flow-type adsorption device. The work was based on studies of adsorption properties of some natural zeolites of Georgian origin and their cation-modified forms by the method of gas-adsorption chromatography, on the example of model mixtures of aggressive gases the results of which proved that mordenite is characterized by the best adsorption capacity with respect to nitrogen oxides. Effect of various factors on adsorption capacity of nitrous gases was studied. These factors are grain size of adsorbent, adsorption regeneration temperature, speed of flow delivery and concentration of nitrous gases in air [1-4].

Experiment was carried out in dynamic conditions on the specially construed laboratory flow-type adsorption device. For adsorbent regeneration adsorption column made of glass filled in with 0.5-1.0 mm size grain H-mordenite (10cm×1cm) was equipped with an electric furnace. In the process of air cleansing, to control a mixture of air to be cleansed, we used an arrangement, which has a rubber holder for taking samples by a syringe

Displacement of model mixture (air+N<sub>2</sub>O+NO<sub>2</sub>) on the adsorption device at the 100 ml/sec speed was carried out for 3 hrs along the preliminarily activated H-mordenite layer. Composition of remainder of a mixture (N<sub>2</sub>O or NO<sub>2</sub>) in the air to be cleansed was determined by the method of gas-chromatography. Experiment proceeded till complete saturation of zeolite layer (at the exit of the layer concentration of a mixture equals to its concentration in initial mixture). Adsorption activity of a sorbent ( $a_{eq}$ , g/100g) and dynamic adsorption activity ( $a_d$ , g/100g) were determined at 20 °C.

**Table. Values of dynamic indices of nitrous gases adsorption process**

Gases which pollute air	Dynamic adsorption activity of adsorbent $a_d, \text{ g}/100\text{g}$	Equilibrium adsorption activity of adsorbent, $a_{eq}, \text{ g}/100\text{g}$	Value of working layer of adsorbent, $L_o, \text{ cm}$	Rate of using of adsorbent layer, $\eta, \%$	Time of protective action of adsorbent, $\tau_{prot.}, \text{ min.}$
N <sub>2</sub> O	0.0112	0.01479	5.84	75.73	372
NO <sub>2</sub>	0.0696	0.09774	4.30	71.21	348

The data of the Table show that tune of protective action ( $\tau_{prot.}$ ) and the value of sorbent working layer ( $L_o$ ) to N<sub>2</sub>O and NO<sub>2</sub> differ. This fact might be explained by different electronic structures of component molecules, which determine their stability and intensity of their interaction with active centers of zeolite. It appears that in the above described process molecular-sieve effect of zeolites is not a decisive factor.

Thus, application of H-form mordenite in the devices for trapping nitrous gases of exhaust gases seems rather perspective.

**References:**

1. Dubinin M.M., Lozhkova N.S., Onusaitis B.A. In: Clinoptilolite, Tbilisi, Metsniereba, 1977, p.101-108.
2. Tsitsishvili G.V., Andronikashvili T.G., Kirov G.N., Filizova L.D. Natural Zeolites; M.: Khimija, 1985, pp 223.
3. Rozenberg G.I. Kuznetsov-Fetisov P.I. In: Main Problems in Theory of Physical Adsorption. M: Nauka, 1970, p.202-206
4. Keltsev N.V. Basis of Adsorption Technique. M: Khimija, 1976, pp 512.

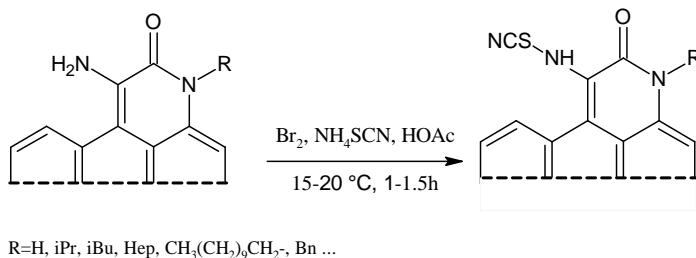
## THE NOVEL FLUORESCENT PROBES WITH ACTIVE THIOCYANATE GROUPS

N. Obolashvili\*, I. Lagvilava, E. Elizbarashvili

Division of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Technology and Metallurgy,  
 Technical University of Georgia, 77 Kostava Str., Tbilisi, 0175, Georgia  
 n\_obolashvili@yahoo.com

The application of fluorescent probes in microbiology and histology is very important. The one type of important molecular probes are reactive dyes with thiocyanate groups widely used in pathogenic cells diagnostic [1-2].

In the present work we developed convenient methods of one-pot-synthesis of thiocyanate moiety containing mono and bis-pyridone active dyes. The physical, optical and chemical properties of obtained compounds have been also studied [3-5].



### Scheme. Synthesis of active fluorescent dyes

The synthesis of desired active dyes means the reaction between a solution of pyridone compound and ammonium thiocyanate in the glacial acetic acid and bromine at 15-20 °C for a period of 1-1.5 h under the mechanical stirring. The reaction mixture was poured into water and precipitated yellow-light brown crystals were separated via filtration [5].

The synthesized thiocyanate derivatives may be used as fluorescent probes. Namely, they are able to stain trace amount of proteins. It has been found, that staining process runs in the water-acetone solution in alkali media (pH 9.0) at the room temperature. The labeled proteins, obtained according to above mentioned methods, have yellow color with green luminescence [3, 4].

**References:**

1. Oyewole O.I., Malomo S.O., Adebayo J.O. *Pak. J. Med. Sci.* 2008, Vol. 24, No.1, p.18-22;
2. Zingde S.M., Anklesaria P.N., Advani S.H., Bhisey A.N., Gothoskar B.P. *Blut.* 1987, 55(2), p.81-85;
3. Obolashvili N.Z., Elizbarashvili E.N., Lagvilava I.V., Topuria Kh.D. *Georgian Engineering News.* No. 4, Vol. 52, 2009, p.103-106;
4. Obolashvili N., Lagvilava I., Elizbarashvili E. *Georgia Chemical Journal*, 2007, 7, 4, p.365-367;
5. Brewster R.Q., Schroeder W. *Organic Syntheses.* 1939, Vol. 19, p.79.

**სილიკატებზე დაფუძნებული ახალი 24-წევრიანი  
მაკროციკლური პოლიაზომეთინები**

**ბ. თოფურია\*, ნ. ოზოლაშვილი, თ. ქარქუსაშვილი,  
ზ. გელაშვილი**

*ორგანული ქიმიის მიმართულეობა, საქართველოს ტექნიკური  
უნივერსიტეტი, კოსტავას ქ. 77, თბილისი, 0175  
kh\_topuria@yahoo.com*

სტაციონარული არაორგანული და ორგანული ბუნების მატრიცებზე იმობილიზებული ორგანული ნაერთების ნომენკლატურა გამუდმებით იზრდება.

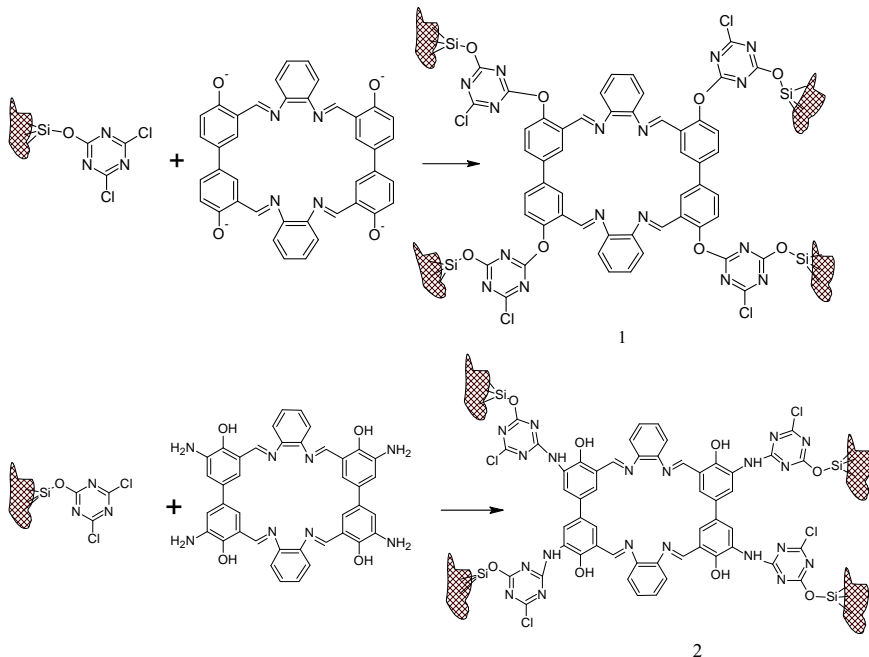
სამეცნიერო ლიტერატურაში აღწერილია სილიკატების ზედაპირზე ისეთი ორგანული ფრაგმენტების, როგორცაა ფენილის, ნაფთილის, თიენილისა და სხვადასხვა ჰეტეროციკლური სისტემების იმობილიზაციის პროცესები და მათი შემდგომი გარდაქმნის საფუძველზე აზოპიგმენტების სინთეზი [1-3].

სამუშაო ეძღვნება ჩვენს მიერ სინთეზირებული ახალი 24-წევრიანი ჩაუნაცვლებელი მაკროციკლური პოლიაზომეთინური ნაერთის და მისი ამინოწარმოებულის (იმობილიზაციას სიმეტრიული ცინურქლორიდით გააქტივებულ სილიკატების ზედაპირზე ლუმინესცენციური თვისებების მქონე პიგმენტების მიღების მიზნით (სქემა).

არაორგანული მატრიცის ზედაპირზე სიმეტრიული ცინურქლორიდის იმობილიზაცია მიმდინარეობს მის სოდიან წყალხსნარზე კარგად გარეცხილი და გამშრალი სილიკატების დამატებით ინტენსიური მორევის პირობებში 0-5 °C ტემპერატურაზე 5-6 საათის განმავლობაში, ხოლო 24-წევრიანი ჩაუნაცვლებელი მაკროციკლური პოლიაზომეთინური ნაერთისა (ფენოლატანიონის ხარჯზე) და მისი ამინოწარმოებულის (პირველადი ამინოჯგუფის ხარჯზე) იმობილიზაციას სიმეტრიული ცინურქლორიდით გააქტივებულ სილიკატებზე 20-25 °C ტემპერატურაზე, ასევე ინტენსიური მორევის პირობებში 3-4 საათის განმავლობაში ჩაუნაცვლებელი აზომეთინისა (1) (მოყვითალო) და ამინირებული აზომეთინის (2) (მოვარდისფრო) მაკროციკლური

პოლიაზომეთინური სილიკაგელების წარმოქმნით. იმობილიზებული ფრაგმენტების ადსორბციის გამორიცხვის მიზნით სილიკაგელი დამუშავდა პირიდინით.

ორგანული ფრაგმენტებით დამყნობილი სილიკაგელების ელექტრონული შთანთქმის სპექტრები ჩაწერილი იქნა მოდიფიცირებული მეთოდით. კერძოდ, დისპერსულ გარემოდ შეირჩა გლიცერინი, რომლის მაღალი სიბლანტის გამო სილიკაგელზე დამყნობილი პოლიაზომეთინების სედიმენტაცია დროის მცირე მონაკვეთში უმნიშვნელოა. ელექტრონული შთანთქმის სპექტრების ანალიზიდან გამომდინარე ლუმინესცენციური თვისების მატარებელი დამყნობილი პოლიაზომეთინების შთანთქმის მაქსიმუმები (5-7 ნმ-ით) არის ჰიფსოქრომულად წანაცვლებული შესაბამის მოდელურ აზომეთინებთან შედარებით.



სქემა. 24-წევრიანი მაკროციკლური პოლიაზომეთინების იმობილიზაცია გააქტივებულ სილიკაგელზე

დამყნობილი პოლიაზომეთინები (1,2) ხასიათდება მაღალი ტექნიკური მახასიათებლებით. ისინი გამოირჩევიან კარგი შუქმედგობითა და სველი დამუშავების მიმართ გაზრდილი მდგრადობით, რაც დამყნობილი ფრაგმენტის ბუნებითა და წარმოქმნილი კოვალენტური ზმის არსებობითაა განპირობებული.

დამყნობილი პოლიაზომეთინები ხასიათდებიან ლუმინესცენციური თვისებით. უი სხივებით დასხივებისას იწვევენ ინტენსიურ ჟოლოსფერ ნათებას.

### **ლიტერატურა:**

1. Чиракадзе Г.Г., Гелиашвили З.Э., Размадзе Т.О. *ЖОРХ*, 2001. т.37. Вып.11, с. 1063-1066..
2. Т.Г. Каркусашвили, З.Э.Гелиашвили, Н.П.Гонгадзе, Г.Г.Чиракадзе, Э.Н. Элизбарашвили. *Грузинский химический журнал*. 2005, №5 (5), с. 512-515.
3. თ. მათითაიშვილი, თ. დუნდუა, ზ. გელიაშვილი, ნ. ღონდაძე, გ. ჭირაქაძე. *საქართველოს მეცნიერებათა აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია*. 2005, ტ.31, №1-2. 85-88.



## ახალი 24-წევრიანი პოლიაზომეთინური მაკროციკლური ნაერთების სინთეზი

**ბ. თოფურია\*, ნ. ოზოლაშვილი, ზ. გელიაშვილი**

*ორგანული ქიმიის მიმართულება, საქართველოს ტექნიკური  
უნივერსიტეტი, კოსტავას ქ. 77, თბილისი, 0175  
kh\_topuria@yahoo.com*

წარმოებაში, მეცნიერების დარგებში და დიაგნოსტიკაში აზომეთინური ნაერთები გამოიყენება როგორც ლუმინოფორული თვისებების მქონე საღებრები და პიგმენტები [1].

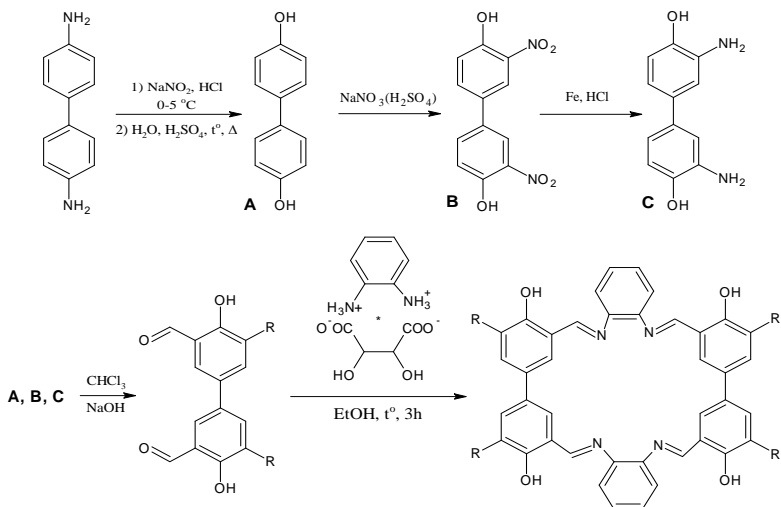
ლიტერატურაში აღწერილია და დღეისათვის მიღებულია მრავალი მონო- და ბისაზომეთინი. უფრო მეტიც, მაშინ როდესაც ძალიან კარგად არის შესწავლილი 5-წევრიანი ციკლური აზომეთინების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები და მიღების მეთოდები, უფრო დიდი ზომის ციკლური აზომეთინები ჯერ-ჯერობით აღწერილი არაა, გარდა 20-წევრიანი მაკროციკლებისა [2].

აქედან გამომდინარე, მაკროციკლური აზომეთინების სინთეზს და ნომენკლატურის გაზრდას, რომელიც მატარებელი იქნება როგორც აზომეთინის, ისე მაკროციკლური ნაერთის თვისებებისა, წარმოადგენს მეტად საინტერესო საკითხს.

სამუშაო ეძღვნება 24-წევრიანი მაკროციკლური აზომეთინური ნაერთების ნიტრო- და ამინოწარმოებულების სინთეზს და მათი ფიზიკურ-ქიმიური მაჩვენებლების შესწავლას.

ნიტროწარმოებულის მისაღებად პოლიაზომეთინური მაკროციკლის სინთეზის სქემაში ჩართულ იქნა დამატებით 4,4-დიჰიდროქსიდიფენილის (A) ნიტრირების სტადია და სინთეზირებულ იქნა ახალი ნახევარპროდუქტი 4,4'-დიჰიდროქსი-5,5'-დინიტრო-3,3'-დიფენილდიალი (B) ( $T_{\text{მლ}} 260-262^{\circ}\text{C}$ ), რომლის კონდენსაციით ო-ფენილენდიამონიუმის ტარტრატთან მიღებულ იქნა მიზნობრივი პროდუქტი, რომელიც წარმოადგენს ღია ყავისფერ ნაერთს,  $T_{\text{მლ}} 210-212^{\circ}\text{C}$ , იხსნება ცხელ წყალში, დიმეთილფორმამიდსა და სხვა პოლარულ გამხსნელებში. ამინოწარმოებულის მისაღებად კი - სინთეზირებული 4,4'-დიჰიდროქსი-3,3'-დინიტროდიფენილის აღდგენა 4,4'-დიჰიდროქსი-3,3'-დიამინობიფენილის წარმოქმნით (C) ( $T_{\text{მლ}} 250-$

252 °C) და მისი ჩართვა კონდენსაციის რეაქციაში. სინთეზირებული ამინოჯგუფის შემცველი მაკროციკლური პოლიაზომეთინი მუქი ყავისფერია, ლლობის ტემპერატურით 200-202°C, ხსნადია ქლოროფორმსა და დიმეთილფორმამიდში.



სადაც: R=H, R=NO<sub>2</sub>, R=NH<sub>2</sub>

სქემა. მიზნობრივი 24-წევრიანი პოლიაზომეთინური მაკროციკლისა და მისი წარმოებულების სინთეზის ზოგადი სქემა

24-წევრიანი მაკროციკლური პოლიაზომეთინების ძირითადი შუალედური პროდუქტების სინთეზისათვის გამოყენებულ იქნება ლიტერატურაში აღწერილი მეთოდები [2,3].

მიღებულ პოლიაზომეთინებს, გარდა ნიტრონაწარმისა, ახასიათებს ლუმინესცენციის უნარი როგორც ხსნარებში, ისე მყარ მდგომარეობაში. უი სინათლით დასხვივება იწვევს ლუმინესცენციას ნარიინჯისფერიდან მუქ-ისფერში.

სინთეზირებული ნაერთები ასევე შესწავლილია სპექტრალური (უი და იწ) ანალიზის მეთოდებით.

ამრიგად, სინთეზირებულია 24-წევრიანი მაკროციკლური პოლიაზომე-თინი და მისი ნიტრო- და ამინოწარმოებულები.

### **ლიტერატურა**

1. Schumaker, R. S. Supramolecular opto-electronic architecture of tautomeric compositions. US pat. 6124963, 2000;
2. Topuria Kh., Elizbarashvili E., Matitashvili T. *Journal of Brazilian Chemical Society*. 2007, 18, 6, 1254-1258;
3. Suvanruji P., Freeman H.S. *Coloration Technology*, 122, p. 27-36 (2005);

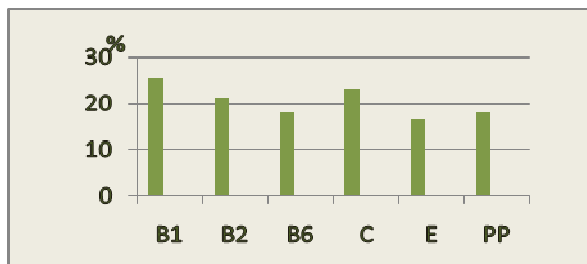
## CHEMICAL COMPOSITION OF THE AROMATIC SPICY HERBS - CARUM CARVI L.

V. Esvanjia<sup>1\*</sup>, T. Abramishvili<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Georgian State Agrarian University, Department of Agrotechnology  
violaesvanjia@mail.ru

<sup>2</sup> Georgian State Agrarian University, Department of  
Agroecology, Tbilisi, Georgia  
theushka@yahoo.com

Among medical products applied in medicine more than 30 % are made of herbs and their share gradually grows ( Sokolov P.1990). In the plantations established for cultivation of plants should be grown herbs with the high maintenance of pharmacological active substances (T. Kacharava, 2004). Among the herbs with growing demand it is necessary to note Carum Carvi L. Its leaves, stalks and seeds are widely used for treatment and preventive maintenance. Seeds of Carum Carvi L. improve reflex of functional digestion. They are applied at stomach aches and intestine, at a cholecystitis, for rising of appetite and at diseases of respiratory tracts. Seeds of Carum Carvi L. are also used in cookeries, and its essential oils in perfumery and cosmetics. For the valuable properties of Carum Carvi L. we decided to study its chemical compound.



**Fig.1. Content of vitamins in seeds of Carum Carvi L.**

Carum Carvi L. is a biannual grassy plant belonging to family Umbelliferae. It is characterized by the maintenance of the most valuable essential oils. Its seeds are extended, two-seed. In a cover of seeds are located oil channels which contain the most valuable essential oils. Its industrial plantations are located in Holland, Hungary, Denmark, Poland, Russia, in the countries of the North Africa, in Egypt

and in a number of the countries of Asia. As a result of researches, it has been established that green parts of *Carum Carvi* L. contain vitamins in a considerable quantity, beta-carotin A, B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, B<sub>6</sub>, C, E, PP and choline. As it is shown in the chart (Fig.1), seeds of *Carum Carvi* L. contains vitamin B<sub>1</sub> in considerable quantity - 25,5%, also in considerable quantity they contain vitamin C -23,3%, the quantity of vitamin B<sub>2</sub> is 21,1%, seeds of *Carum Carvi* L. contain equal quantity of vitamins PP and B<sub>6</sub> -18-18%, as to vitamin E it is contained in small quantity and makes 16,7%. Seeds of *Carum Carvi* L. contain valuable essential oils - 3-6%, which consist of substances  $\alpha$ -carvone C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O, d-limonene C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>- 40-50% causing a pungent smell of seeds, canvacrol, 20-30%- dihydrocarvone C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O and dihydro canvacrol -40-70%. Also contain fat oils 14-21%, fibers-20-23%, steroids- 0,02%, coumarins C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub> -0,48%. As a result of researches it has been established that the maintenance of extractive substances and essential oils in seeds of *Carum Carvi* L. taken from different regions of Georgia is different. As it is clear from the table, the maintenance of essential oils in 1000 seeds of *Carum Carvi* L. collected in Tianeti contains 1,25g of essential oils, i.e. 1,2g of *Carum Carvi* L. seeds contain 2g of essential oils. From the investigated regions it is the best result. The maintenance of essential oils in seeds of *Carum Carvi* L. collected in Kazbegi and Tskhaltubo are identical, though it is less than in the seeds collected in Tianeti. The lowest maintenance of essential oils is noted in seeds collected in Mtskheta-1,8%. The pungent smell of *Carum Carvi* L. seeds becomes perceptible in forms with the high maintenance of essential oils. Despite the fact that *Carum Carvi* L. is extended on the whole territory of Georgia, the maintenance of essential oils and extractive substances in it is defined by the ecological conditions of their growth place. That has been proved to be true and in our case, too.

**Table 1 .The chemical composition of the endemic forms of *Carum Carvi* L.**

#	Regions	1000 mass from caraway seeds g	Extract substances%	Essential oils%
1	Manglisi	1,8	18	1,9
2	Kazbegi	1,5	21	2,3
3	Tianeti	1,2	22	2,2
4	Mtskheta	1,8	18	1,8
5	Oni	1,7	23	2,2
6	Tskhaltubo	1,4	19	1,9

**Conclusion.** As a result of researches it is established that caraway seeds of *Carum Carvi* L. contain high quantity of vitamins, especially vitamins B<sub>1</sub>, C, B<sub>2</sub>. It is established that the percentage of essential oils and extract substances is defined by ecological conditions of their growth place.

### **References**

1. Sokolov P. Plant resources in the USSR – flowering plants, their chemical composition and use, Vol. 5, Leningrad, 1990.
2. [www.tealive.ru](http://www.tealive.ru), June 13<sup>th</sup>, 2010.
3. Kacharava T., Esvanjia E. *Bulletin of Georgian Academy of Agricultural Sciences*, 2004, pp.70-72.
4. Medicinal plants of the USSR, Pub. of medical lit-re, 1962, pp.313-704.

## QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF POSSIBLE TAUTOMERIC TRANSFORMATIONS OF CYTOSINE

M. Kvaraia<sup>\*</sup>, J. Kereselidze, Z. Pachulia

Sokhumi State University  
zupach@yahoo.com

The energetic study of tautomeric transformations of the nucleotide bases is directly connected with mutation processes in DNA. The energy of activation ( $\Delta E^\ddagger$ ) and energy of reaction ( $\Delta E$ ) of to five tautomeric transformation: (1-2), (2-3), (1-4), (4-5) and (4-6) of cytosine by means of non empirical quantum-chemical non empirical method DFT (Density Functional Theory) were calculated. The results of calculations are given in the table, from which it is visible, that (1-4) transformation is itself steady, energetic characteristics which the lowest values have. From the analysis of the received data follows, that the energetic characteristics can be used for a choice by steadiest of the tautomeric form of cytosine, which can participate in mutation processes in DNA.

#	$\Delta E^\ddagger$ , kJ/mol	$\Delta E$ , kJ/mol	Transformation
1-2	85.6	27.5	2-oxo-4-amino $\leftrightarrow$ 2-hydroxy-4-amino
2-3	65.7	-12.8	2-hydroxy-4-amino $\leftrightarrow$ 2-oxo-6-amino
1-4	75.4	31.8	2-oxo-4-amino $\leftrightarrow$ 2-oxo-4-amino
4-5	127.4	92.7	2-oxo-4-imino $\leftrightarrow$ 2-hydroxy-4-imino
4-6	116.2	78.4	2-oxo-4-amino $\leftrightarrow$ 2-hydroxy-6-imino

**იზონიკოტინჰიდრაზიდის (ტუბაზიდის) ლითონებთან კომ-  
პლექსნარმოქმნის უნარინობაზე გამხსნელის ბავლენის  
ქვანტურ-ქიმიური ბამოკვლევა**

**ნ.თაბუაშვილი, მ.ცინცაძე**

*საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი*

ქვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით გამოთვლილი იქნა იზონიკოტინჰიდრაზიდის (ტუბაზიდის) ენერგეტიკული, ელექტრონული და სპექტრალური მახასიათებლები. იზონიკოტინჰიდრაზიდის წარმოქმნის სითბო სხვადასხვა გამხსნელში, აირად მდგომარეობასთან შედარებით მცირდება, რაც მიუთითებს იმაზე, რომ გამხსნელი (წყალი, დიმეთილსულფოქსიდი, მეთანოლი, ეთანოლი, აცეტონი, ქლოროფორმი, ჰექსანი) ზრდის მის მდგრადობას, დიპოლური მომენტი კი პირიქით, აირად მდგომარეობასთან შედარებით, იზრდება და მაქსიმალური მნიშვნელობა აქვს წყალში.

გამხსნელი იზონიკოტინჰიდრაზიდის ჟანგბადის ( $O_1$ ) ჰეტეროციკლის ( $N_8$ ) ამინოჯგუფის აზოტის ( $N_4$ ) ატომების მუხტის ქმედებას ზრდის და მაქსიმალური სიდიდე მიიღწევა წყალში, გარდა ამისა, ატომური ორბიტალების დასახლების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ მათ 25 ორბიტალზე ელექტრონების დასახლება ხასიათდება მალაღი დასხივებით, რაც განაპირობებს ლითონებთან კომპლექსის წარმოქმნის მაღალ უნარს.

ამრიგად, იზონიკოტინჰიდრაზიდს შეუძლია კოორდინირება ლითონებთან ჰეტეროციკლის აზოტის ( $N_8$ ) ატომის მეშვეობით ან კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ( $O_1$ ) და ამინოჯგუფის აზოტის ( $N_4$ ) მეშვეობით ან კიდევ სამივე ატომის  $O_1$ ,  $N_4$  და  $N_8$  ატომების მეშვეობით

შევიშნავთ, რომ ქვანტურ-ქიმიურ მონაცემებს სრულად ადასტურებს მრავალრიცხოვანი ნაერთების სპექტრალური და რენტგენოსტრუქტურული კვლევის შედეგები.





# **Authors Index**



**A**

Abramishvili T., 75  
Alexishvili M., 58

**B**

Barbakadze N., 40  
Berdzenishvili I., 51  
Bokuchava N., 49, 50

**C**

Cedazo-Mínguez A., 60  
Chaladze R., 58  
Chigogidze N., 44  
Chikvaidze I., 40, 42  
Cifuentes A., 60

**D**

Donadze M., 48

**E**

Ebanoidze L., 49  
Elizbarashvili E., 3, 11, 23, 24, 27, 28,  
67  
Esvanjia V., 75

**G**

Gil-Bea F., 60  
Gvaramia M., 58

**I**

Ibáñez C., 60  
Ivalishvili T., 44

**K**

Kalatozishvili A., 42  
Karkusashvili N., 53  
Kenchadze Sh., 27  
Kereselidze J., 78  
Khomasuridze M., 46  
Kikalishvili M., 48  
Kokiashvili N., 58  
Kordzakhia K., 65  
Kotrikadze D., 25  
Kvaraia M., 78  
Kverashvili N., 23

**L**

Lagvilava I., 23, 67  
Lominadze N., 58

**M**

Mamaiaashvili Kh., 46  
Matitaishvili T., 24, 27, 28  
Memarnishvili N., 44  
Mosiashvili L., 51  
Mtsariaashvili L., 55, 57

**O**

Oboladze, 40  
Obolashvili N., 67

**P**

Pachulia Z., 78

**R**

Rachvelishvili N, 29

Rubashvili I., 65

Rukhadze M., 58

**S**

Samakashvili Sh., 60

Samsoniya S., 32, 36, 39, 40

Samsoniya Sh., 42

Sarukhanishvili A., 49

Shavliashvili N., 44

Simó C., 60

Siradze M, 51

Skhiladze R., 44

Suladze T., 53

**T**

Targamadze N., 42

Tsivtsivadze T., 44

**W**

Winblad B., 60

**Б**

Букія Т., 31

**Г**

Гоголашвили И., 35

**З**

Зурабишвили Д., 31, 32, 35, 36, 39

**П**

Панцулая Г., 35

**С**

Самсония Ш., 31, 32, 34, 35, 36, 39

**Т**

Трапаидзе М., 35

**Э**

Элизбарашвили Э., 31

**ა**

აგლაძე თ., 21

**ბ**

ბელიაშვილი ზ., 69, 72

გვერდწითელი მ., 54

**ე**

ესაკია ნ., 37

**ზ**

ზურაბიშვილი დ., 37

**თ**

თოფურია ხ., 69, 72

**კ**

კუპრაშვილი ნ., 37

**მ**

მუზაშვილი თ., 62

**ნ**

ნიკოლეიშვილი ნ., 33, 37

**ო**

ობოლაშვილი ნ., 69

ობოლაშვილი თ., 72

**ს**

სამსონია შ, 33

სამსონიამ, 19, 37

**ტ**

ტრაპაიძე მ., 33, 37

**ფ**

ფანცულაია გ., 33

**ქ**

ქარქუსაშვილი თ., 69

**შ**

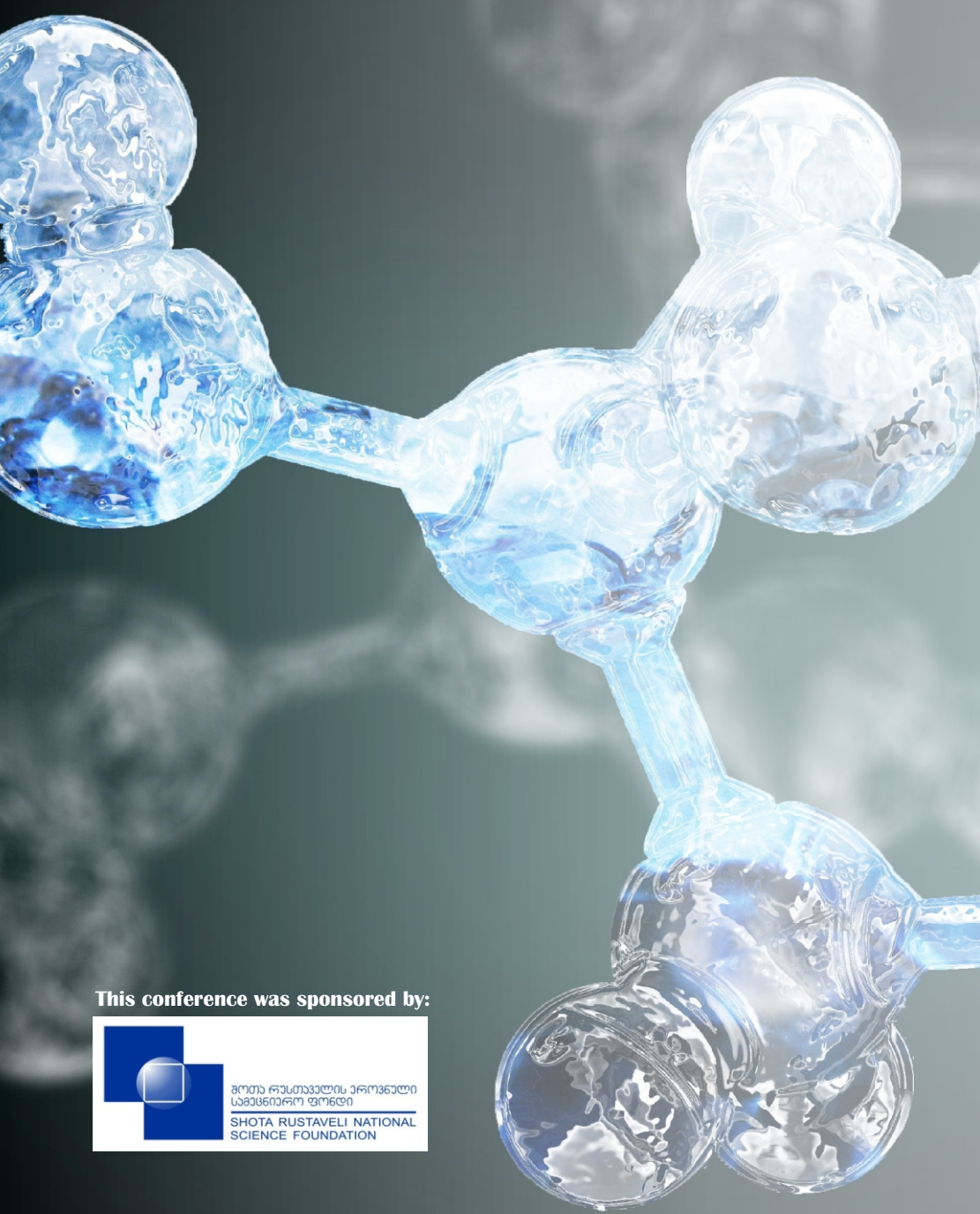
შარაშიძე თ., 54

## ՅԱՆՈՒՅՑՎԵԾԻՆՆԱԴՅՈՒՆ









**This conference was sponsored by:**



შოთა რუსთაველის ეროვნული  
სამეცნიერო ფონდი  
SHOTA RUSTAVELI NATIONAL  
SCIENCE FOUNDATION