

სსიპ – ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა და ჯანდაცვის ფაკულტეტი
ქიმიის დეპარტამენტი



ჯეირან ფუტყარაძე

**Prunus cerasifera Ehrh ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების ქიმიური შედგენილობისა და
ანტიოქსიდანტური აქტიურობის დადგენა**

(წარდგენილია ქიმიის დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად)

სპეციალობა: ბუნებრივ ნაერთთა ანალიზი

სამეცნიერო ხელმძღვანელი: პროფესორი

ბიოლოგიის მეცნიერებათა დოქტორი

ალეკო კალანდია

ა ნ ო ტ ა ც ი ა

ბათუმი-23

სადისერტაციო ნაშრომი შესრულებულია ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა და ჯანდაცვის ფაკულტეტის ქიმიის დეპარტამენტში.

აღნიშნული პროექტი განხორციელდა სსიპ შოთა რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის ფინანსური ხელშეწყობით (გრანტი AP/96/13; PHDF-22-2895

სამეცნიერო ხელმძღვანელი:

ალეკო კალანდია

პროფესორი, ბიოლოგიის მეცნიერებათა დოქტორი, ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტი.

შემფასებლები:

გიორგი ქვარცხავა

ქიმიის დოქტორი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის პროფესორი;

ანა გოლეტიანი

ქიმიის დოქტორი, შოთა რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდი, „ჰორიზონტი ევროპა“ საქართველოს ეროვნული ოფისი.

მერაბი არძენაძე

ტექნოლოგიის დოქტორი; ბსუ-ს აგარარული და მემბრანული სამეცნიერო-კვლევითი ინსტიტუტი, მთავარი მეცნიერი თანამშრომელი

სადისერტაციო ნაშრომის დაცვა შედგება 2023 წლის 21 ივლისს ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა და ჯანდაცვის ფაკულტეტის სადისერტაციო საბჭოს სხდომაზე.

მისამართი: ბათუმი ნინოშვილის/რუსთაველის ქ. № 35 /№ 32

სადისერტაციო ნაშრომის გაცნობა შესაძლებელია ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ბიბლიოთეკაში, ასევე უნივერსიტეტის ვებ გვერდზე www.bsu.edu.ge

შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის

საბუნებისმეტყველო. მეცნიერებათა და ჯანდაცვის ფაკულტეტი

სადისერტაციო საბჭოს მდივანი:

ნანა ზარნაძე

შესავალი

ნაშრომის აქტუალურობა: ქვეყნის სასურსათო უზრუნველყოფისათვის და საერთაშორისო ბაზარზე მაღალი ხარისხის, ნატურალური კვების პროდუქტების გატანის მიზნით, საქართველოს ეკონომიკაში კვლავ აქტუალურია ხილის და მისი გადამამუშავების პროდუქტების განვითარების ძირითადი მიმართულებების განსაზღვრა და წარმოების ხელშეწყობა. მაღალხარისხოვანი პროდუქციის წარმოების საფუძველს წარმოადგენს ხარიახიანი ნედლეული, რაც გამოიხატება მის ქიმიურ შედგენილობაში. საკვებისაგან ადამიანის ჯანმრთელობაზე შესაძლო სარგებლის დასადგენად, აუცილებელია მასში შემავალი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების იდენტიფიცირება და რაოდენობრივი შემცველობის განსაზღვრა. აღნიშნულ ინგრედიენტებს მიეკუთვნება ვიტამინები, ორგანული მჟავები, ანტოციანები, ფლავონოიდები და სხვა.

ასევე უდიდესი მნიშვნელობა აქვს ნედლეულის გადამამუშავების კომპლექსურობას და გადამამუშავების ნარჩენების შესწავლას, კერძოდ ტყემლის ნაყოფების სამრეწველო გადამამუშავების ნარჩენები დაბალი ღირებულებებისა და ადვილი ხელმისაწვდომობის გამო, რომელიც სხვა მხრივ შეიძლება გადაყრილი იქნას გარემოში როგორც ნაგავი, შეიძლება მივიჩნიოთ ნუტრიცევტიკების მნიშვნელოვან წყაროდ. ბიოაქტიური ნაერთებით მდიდარი დღევანდელი წარმოებისათვის არასასურველი ნარჩენები შეიძლება გადამამუშავდეს, როგორც დამატებითი ღირებულების საკვებ დანამატებად, რომლებიც თავის მხრივ შეიძლება გამოყენებულ იქნეს ფუნქციონალური დანიშნულების პროდუქტების შემამუშავებაში.

ინტერესი *Prunus* გვარის ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთებით მდიდარი ნედლეულის და მისგან მიღებული პროდუქტების მიმართ მთელს მსოფლიოში საკმაოდ მაღალია. შესწავლილია როგორც ნაყოფის, კურკის და ასევე ფოთლის ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთები [1-11]. დიდი ინტერესია უშუალოდ ტყემლის (*Prunus cerasifera* Ehrh) მიმართაც. ნაყოფში იდენტიფიცირებულია მრავალი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთი [12,13], შესწავლილია მირობელას (*Prunus cerasifera* L.) ახალი სელექციური ფორმების ქიმიური შეგენილობა და მათი დამოკიდებულება ნაყოფის გემურ მახასიათებლებზე [14,15] რამდენიმე ჯიშში (თურქეთი) შესწავლილია ნაყოფში ნახშირწყლების, ორგანული მჟავების და სხვა შემცველობა ნაყოფის დამწიფების პერიოდში [16]. შესწავლილია მათში ფენოლური ნაერთების, ორგანული მჟავების რაოდენობრივი შემცველობა [17-21], ჰიბრიდულად მიღებული ჯიშების ქიმიური შედგენილობა [22,23], კურკაში აირ-სითხური ქრომატოგრაფიის მეთოდით დადგენილია ცხიმის და ცხიმმჟავათა შემცველობა [24-27], ბიოდიზელის მიღების შესაძლებლობები [28], ნაყოფის ანტიოქსიდანტური და ანტიბაქტერიული აქტივობები [29-32]. *Prunus cerasifera* ფოთლებში HPLC-DAD/ESI-MS მეთოდის გამოყენებით შესწავლილი იქნა ანტოციანების შემცველობა და იდენტიფიცირებულია რამდენიმე ფენოლკარბონმჟავა [33-36]. მიღებული პრეპარატები გამოყენებული იქნა ნანოპრეპარატის მისაღებად [37].

Prunus cerasifera tree gum შესწავლამ აჩვენა მასში დომინანტი არაბინოზა და გალაქტოზა [38].

ტყემალი *Prunus cerasifera* საქართველოში ძალზე გავრცელებული მცენარეა. გვქდება მისი როგორც ველური, ასევე კულტურული ფორმების ნარგაობები [39]. ნაყოფისაგან საქართველოს ყველა კუთხეში ამზადებენ განსხვავებული რეცეპტურით პროდუქტებს: საწებელი, ტყლაპი, ყორაო, ჯემი, მურაბა და სხვა. მიუხედავად ამისა, ჩვენს მიერ განხილულ მრავალფეროვან ლიტერატურაში, მხოლოდ 1981 წელს გამოცემული ნაშრომები შეეხება საქართველოში მოყვანილი ტყემლის ნაყოფის კვლევას [40,41], ასევე მის მორფოლოგიურ მრავალფეროვნებას [42].

პრობლემის ფორმულირება- კვლევის თანამედროვე მდგომარეობა საქართველოში შეიძლება ითქვას ძალზე არა სრულყოფილია. პრაქტიკულად არ არსებობს მონაცემები საქართველოს პირობებში მოყვანილი ტყემლის ნაყოფის ქიმიური შედგენილობის შესახებ. არსებობს არასრული ფიზიკურ-ქიმიური მონაცემები საქართველოს აგროკლიმატურ პირობებში გავრცელებული ტყემლის ნაყოფების შესახებ. კვლევები ძირითადად ჩატარებულია 30-40 წლის წინ, ბუნებრივია მაშინ შესაძლო ტექნიკური საშუალებებით. ჩვენს მიერ შესწავლილი რამდენიმე ასეული სამეცნიერო პუბლიკაციიდან, სამწუხაროდ არ იძებნება არც ერთი კვლევა საქართველოში გავრცელებული ტყემლის ნაყოფის ან წარმოების ანარჩენების შესახებ, არც ერთი ავტორი არ არის ქართული სამეცნიერო წრიდან. სამეცნიერო ტექნიკის სიმწირის გამო სრულად შეუსწავლეია ქვეყნის სინამდვილეში, მცენარეული ნედლეულის და მისი გადამამუშავებელ საწარმოთა ანარჩენების გამოყენების შესაძლებლობები. საქართველოს სინამდვილეში სრულიად შეუსწავლეია ტყემლის ნაყოფის ბიოაქტიური ნაერთები და მისგან მიღებული პროდუქტების (მათ შორის პრეპარატები) გამოყენების პერსპექტივები. მეორეს მხრივ ჩვენს მიერ გაცნობილი ლიტერატურა მოწმობს (რამდენიმე ათეული უახლესი პუბლიკაცია), რომ მცენარეული ნედლეულისა და გადამამუშავების ანარჩენების ვალორიზაციის საკითხი ინოვაციური ტექნოლოგიების გამოყენებით, გარემოზე უარყოფითი ზემოქმედების შესუსტების მიზნით ციკლური ეკონომიკის პრინციპების გამოყენება პრიორიტეტული საკითხია.

დღეისათვის შექმნილი სასურსათო უსაფრთხოების საკითხების გათვალისწინებით, აუცილებელია საქართველოს სინამდვილეში განსაკუთრებით ენდემური მცენარეების ექსტრაქციის მეთოდების ოპტიმიზაცია, ბიოაქტიური პრეპარატების მიღების ტექნოლოგიების შემუშავება, მათი ქიმიური შედგენილობის კვლევა თანამედროვე მეთოდების მეშვეობით და მათი გამოყენების პერსპექტივების დადგენა.

შეიძლება დავასკვნათ, რომ მიუხედავად ტყემლის და ტყემლის ნაყოფისგან მიღებული პროდუქტების პოპულარობისა, საქართველოს სინამდვილეში სრულად შეუსწავლეია

ტყემლის ნაყოფის ბიოაქტიური ნაერთები და მათგან მიღებული პროდუქტების ქიმიური შედგენილობა და გადამუშავების დროს მიმდინარე ცვლილებები.

კვლევის მიზანი და ამოცანები. საქართველოში გავრცელებული ტყემლის (*Prunus cerasifera* Ehrh) ველური ფორმების და კულტურული ჯიშების ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების (ფენოლური ნაერთების, ეთერზეთების, კურკის ლიპოიდური ნაერთების და სხვა) გამოყოფა და იდენტიფიკაცია, მათი რაოდენობრივი შემცველობის შესწავლა, ნედლეულის გადამუშავების ოპტიმალური პირობების დადგენა და მათგან ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთებით მდიდარი პროდუქტების, კონცენტრატების და პრეპარატების მიღების ტექნოლოგიის შემუშავება. ტყემლის ნაყოფის გადამუშავებით მიღებული პროდუქტების ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების ქიმიური შედგენილობის და ანტიოქსიდანტური აქტივობის დადგენა.

მეცნიერული სიახლე საქართველოს სინამდვილეში პირველად იქნება შესწავლილი ტყემლის ნაყოფის სრული ქიმიური შედგენილობა (სისტემური კვლევა ქრომატოგრაფირებით-HPLC-UV,Vis,RI, UPLC-MS,PDA GC, სპექტრალური ანალიზი, ინფრაწითელი სხივით ანალიზი და კვლევის კლასიკური ფიზიკურ-ქიმიური მეთოდებით) ტყემლის ბიოაქტიური ნაერთების თვისობრივი და რაოდენობრივი შედგენილობა. შესაძლებელი გახდება ნაყოფის კომპლექსური გადამუშავების და გადამუშავების ნარჩენების ვალორიზაციის და გარემოზე უარყოფითი ზემოქმედების შესუსტების მიზნით ციკლური ეკონომიკის პრინციპების გამოყენებაზე დაფუძნებული ინოვაციური ტექნოლოგიების შემუშავება.

სხვა თანამედროვე ფიზიკურ-ქიმიური მეთოდების გამოყენებით გამოყოფილი და იდენტიფიცირებული იქნა 5 ანტოციანი, 7 ფლავონოიდი და 5 ფენოლკარბონმჟავა. ტყემლის კურკისაგან მიღებული ცხიმზეთის შემადგენლობაში დაფიქსირებული იქნა 21 კომპონენტი, ამათგან იდენტიფიცირებულია 13 კომპონენტი.

ნაშრომის პრაქტიკული მნიშვნელობა - შესწავლილია ნაყოფის და მისი ტრადიციული ტექნოლოგიით გადამუშავებისას მიღებული პროდუქტების ბიოაქტიური ნაერთების შედგენილობა და მათი ბიოლოგიური აქტივობა. შერჩეულია ტექნოლოგიური მეთოდები, რომლებიც უზრუნველყოფენ ბიოაქტიური ნაერთების მაქსიმალურად შენარჩუნებას. წარმოების ანარჩენების ვალორიზაციის მეთოდები მეწარმეებს საშუალებას მისცემს აწარმოონ ბაზარზე მოთხოვნადი ბიოლოგიურად აქტიური პროდუქტები და პრეპარატები.

კვლევის ობიექტი, მასალა და მეთოდიკა: ნაყოფებს ვიღებდით 2016-2021 წლებში სხვადასხვა თვეში ნაყოფის სამომხმარებლო სიმწიფის პერიოდში. კვლევის ობიექტს წარმოადგენს ტყემლის (ლათ. *Prunus cerasifera* Ehrh) ველური ფორმების და კულტურული ჯიშების ნაყოფები.

ტყემალი მრავალწლოვანი ხეხილოვანი მცენარეა ვარდისებრთა ოჯახის კურკოვანთა გვარის, ზოგჯერ ხისმაგვარი ბუჩქია, ძლიერ დატოტვილი, ეკლიანი ან უეკლო. ნაყოფს მომრგვალო, მობრტყო-მომრგვალო ან კვერცხისებრი ფორმა აქვს. ის ხარობს როგორც კულტივირებულ, ასევე არაკულტივირებულ ტერიტორიაზე. ქმნის სქელ ეკლოვან მასას, რომელიც შეიძლება ნაპოვნი იქნას გზებთან, არხებთან, წყალმარხ ადგილებში ქარის საწინააღმდეგო მიმართულებით.

ნაყოფის ფერი ყვითელი, წითელი და იისფერია, ზოგჯერ თითქმის შავი. ნიადაგისადმი ნაკლებ მომთხოვნი, დაავადებებისადმი მედეგი, გვალვა და ყინვაგამძლეა. მოსავლიანობა ზრდასრული ხიდან 300 კგ-მდეა. მეხილეობაში იყენებენ ქლიავის, ატმისა და გარგარის საძირედ. ველურად და კულტურაში გავრცელებულია ბალკანეთში, შუა და მცირე აზიაში, ირანში, ამიერკავკასიაში და სხვა.



სურ1. ტყემალი *Prunus cerasifera* Ehrh

საქართველოში უძველესი დროიდან თითქმის ყველგანაა გავრცელებული ზღვის დონიდან 1600-1800 მეტრამდე სიმაღლეზე. ამჟამად დარაიონებული ჯიშებია გულდედავა, გაზაფხულის მერცხალი, წითელი დროშა, ქუთაისი, რიონი, ხვაციანი და სხვა.



სურ 2. გაზაფხულის მერცხალი (*Prunus cerasifera* 'Gazapkulis Merckhali' ადრეული ჯიშია, ნაყოფი თანაბრად მწიფდება 20 ივნისიდან.



სურ 3. მირაბელი სიმწიფეს აღწევს და იკრიფება ივლისიდან სექტემბრის შუა რიცხვებამდე



სურ 4. აჭარული ვარდისფერი (10/VIII - 25/VIII).



სურ 5. წითელი დროშა -ტყემლის ქართული ჯიშია, მიღებულია კლონური სელექციის გზით ნაყოფი მწიფდება ივლისის პირველ ნახევარში



სურ 6. ახალციხურა აგვისტო



სურ 7. აჟანის უნგრულა. მწიფდება აგვისტოს შუა რიცხვებში.



სურ 8. ველური ტყემლი



სურ 9.ველური ტყემალი

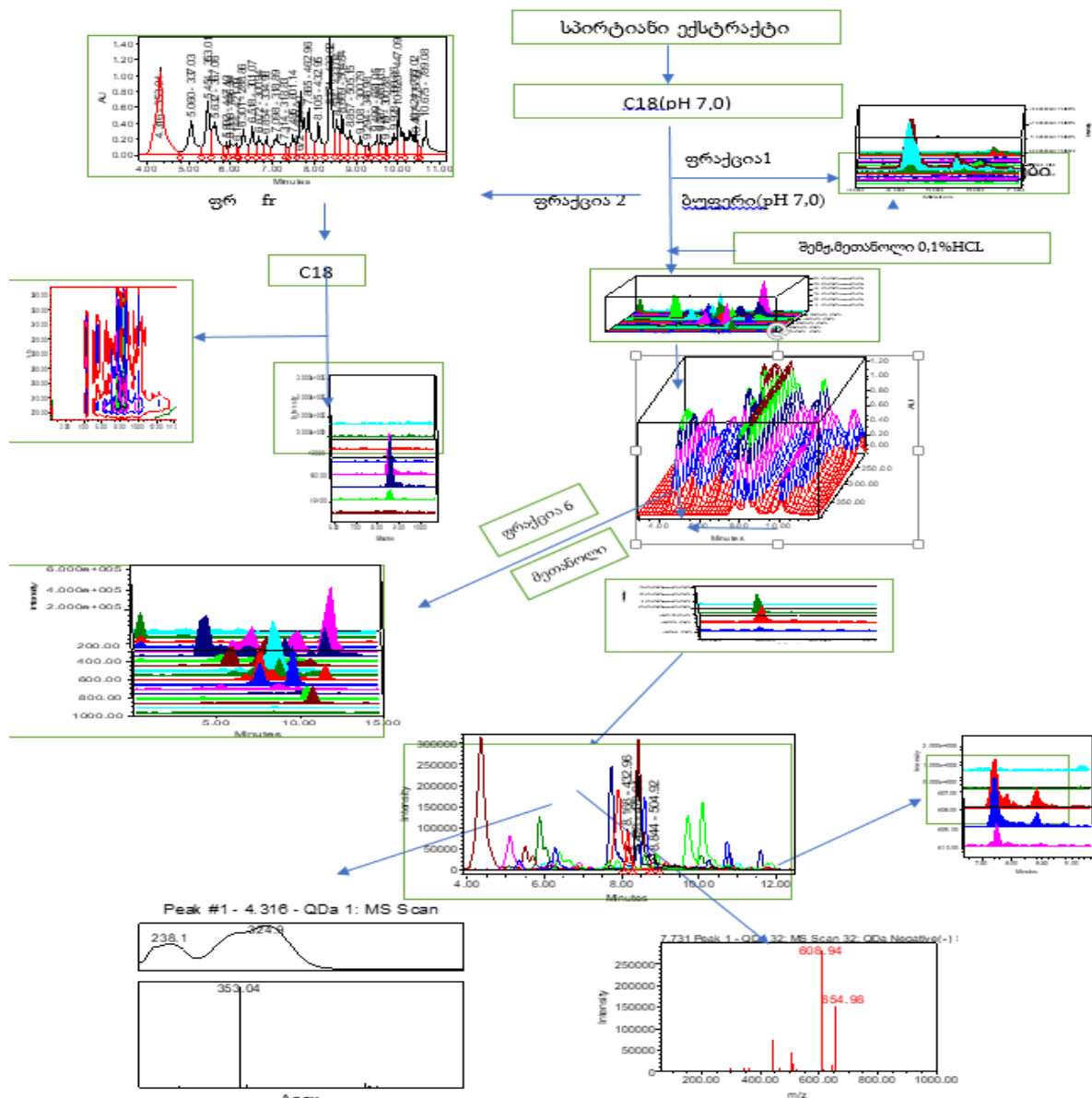


სურ 10. ველური ტყემალი

ტყემლის ნაყოფები წარმოშობის მიხედვით საკმაოდ განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან. ველური ფორმები მცირე ზომის ნაყოფებს იძლევა განივი ჭრილით დაახლოებით 20 მმ-დე და გრძივი ჭრილით დაახლოებით 25 მმ-მდე, მაშინ როდესაც კულტურული ჯიშების ნაყოფები მწვანე ფოთოლა წითელნაყოფას შემთხვევაში 27 და 30 მმ-მდეა შესაბამისად, ხოლო წითელფოთლიანი წითელნაყოფა ფორმის შემთხვევაში კიდევ უფრო მეტი 35 და 37 მმ-მდეა. შესაბამისად განსხვავებული ნაყოფის მასა და მოცულობა. ველურ ფორმებში ნაყოფის მასა 6-8 გ-ია, ხოლო კულტურულ ჯიშებში ნაყოფის მასა 18-25 გ-ია (ცხრილი 1).

ტყემლის ნაყოფის ფიზიკური მახასიათებლები ცხრილი 1.

ნაყოფი	ფორმა	ფერი	გემო	ზომა (მმ)		მასა (გ)	მოცულობა (მლ)
				გრძივი ჭრილი	განივი ჭრილი		
გაზაფხულის მერცხალი (გონიო) 29.06	მომრგვალო, ოდნავ წაგრძელებული, მთელსიგრძეზე ემჩნევაღარი	მოწითალო ოდნავ ვარდისფერი	მომჟავო - ტკბილი	27.4±0.82	25.6±0.76	10.4±0.41	10.0±0.3
მირაბელა (გონიო 31.07)	მრგვალი	ყვითელი	მოტკბო	36.63±1.17	37.37±1.19	25.34±0.96	26.0±0.83
აჭარული ვარდისფერი (ხულო03.08)	ოდნავ წაგრძელებული	მოწითალო - ვარდისფერი	მოტკბო -მომჟავო	31.24±1.06	28.49±0.96	13.46±0.48	13.46±0.45
წითელი დროშა (ხულო03.08)	მრგვალი, შესამჩნევი ღარით	მუქი ბორდოსფერი	მოტკბო -მომჟავო	35.9±1.22	32.7±1.11	18.7±0.63	19.0±0.68
წითელი დროშა (გონიო 05.08)	მრგვალი	წითელი	მოტკბო -მომჟავო	32.7±1.17	27.9±0.97	13.5±0.43	14.0±0.56
ახალციხურა 13.08	კვერცხისებური	მუქი წითელი	მოტკბო	22.89±0.80	23±0.82	7.1±0.21	7.0±0.21
აქანის უნგრულა(ქ.ბა თუში 16.08)	ოვალური	მომწავო-მოლურჯო სანთლისებრი ფიფქებით დაფარული	მომჟავო - მოტკბო	29.9±1.07	26.9±0.96	12.83±0.41	12,4±0.39
ველური წითელი ტყემალი(ხულო,დანისპარაული07.08)	მოგრძო	ბორდოსფერი	მოტკბო -მომჟავო	23.8±0.90	20.6±0.78	6.3±0.21	6,1±0.23
ველური,წითელი(ხულო24.09)	მოგრძო-მომრგვალო	წითელი	მომჟავო მოტკბო	26.4±1.05	27.4±1.09	10.2±0.35	10,0±0.35
ველური,მუქი წითელი(ხულო 24.09)	მოგრძო	მუქი წითელი	მოტკბო -მომჟავო	26.1±0.78	20.8±0.62	6.5±0.23	7,0±0.25
მუქი წითელი.ხულო,ლორჯომი,მთა მყვირალა,ველური	მრგვალი	მუქი წითელი	მოტკბო - მომჟავო	21.28±0.68	20.48±0.65	5.3±0.20	5.2±0.17



სქემა 1 ტყემლის ნაყოფის კვლევა

ტყემლის ნაყოფის ბიოაქტიური ნაერთების გამოყოფა და იდენტიფიკაცია

ნივთიერებების გამოყოფა და იდენტიფიკაცია განხორციელდა მაღალ ეფექტური სითხური (HPLC-UV, Vis, RI, Conductivity და ულტრამაღალი ეფექტური სითხური მას-სპექტრალური ქრომატოგრაფირების (UPLC PDA-MS) მეთოდით; ნაერთების (საერთო ფენოლები, ფლავონოიდები, ანტოციანები, კაროტინოიდები, პექტინი) რაოდენობრივი შემცველობა და ანტიოქსიდანტური აქტივობა განისაზღვრა სპექტრალური მეთოდით; კვლევისას გამოყენებული ყველა გამხსნელი (მეთანოლი, აცეტონიტრილი, ჭიანჭველმჟავა, იყო ქრომატოგრაფიულად სუფთა მასსპექტისათვის (Merk, Germany).

1. ინდივიდუალური ნაერთების გამოყოფა შერჩევითი ექსტრაქციით და პრეპარატიული ქრომატოგრაფირებით (HPLC-UV, Vis).
2. ანტოციანების, ფლავონონ გლიკოზიდების და ფენოლკარბონმჟავების იდენტიფიკაცია მაღალეფექტური და ულტრა მაღალეფექტური სითხური ქრომატოგრაფირების HPLC-UV, Vis, RI, UPLC-PDA, MS მეთოდით.
3. ფენოლური ნაერთების რაოდენობრივი შესწავლა HPLC-UV, Vis, UPLC-PDA, MS ქრომატოგრაფიის მეთოდით.
4. კათიონების თვისობრივი და რაოდენობრივი განსაზღვრა HPLC—Conductivity methods.
5. ანტიოქსიდანტური აქტივობის განსაზღვრა (2,2-დიფენილ-1-პიკრილ იდრაზილისსტაბილური რადიკალის გამოყენებით) DPPH მეთოდით.
6. ფლავონოიდების რაოდენობრივი განსაზღვრა სპექტრალური მეთოდით ($AlCl_3$ -ის რეაქტივი, რუთინზე გადაანგარიშებით).
7. საერთო ფენოლების რაოდენობის განსაზღვრა ფოლინ-სიოქალტეუს მეთოდით (Folin-Ciocalteu) (გალის მჟავაზე გადაანგარიშებით);
8. ლიპიდური კომპლექსის განსაზღვრა აირ-ქრომატოგრაფიული (GC) მეთოდით (GC Thermo).

სამუშაოს აპრობაცია - კვლევის შედეგები ასახულია 3 სამეცნიერო სტატიასა და 4 საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციის მასალებში.

გამოყვეყნებული სამეცნიერო შრომები:

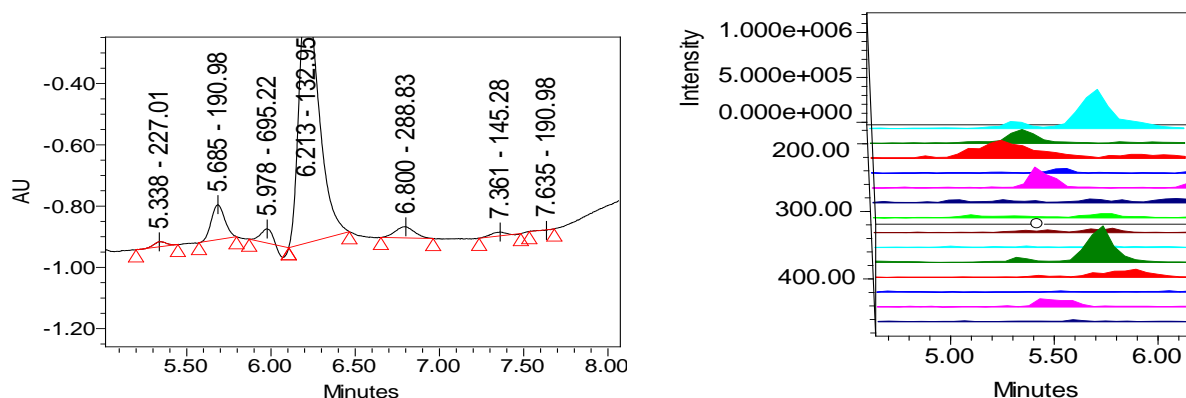
1. JeiranPutkaradze, Mzia diasamidze, Maia Vanidze, Aleko Kalandia/ Antioxidant Activity of Prunus cerasifera products// <http://www.crdeepjournal.org/wp-content/uploads/2021/06/Vol-10-3-2-IJLS.pdf>, 2022;
2. JeiranPutkaradze, Mzia diasamidze, Maia Vanidze, Aleko Kalandia/ The Waste Obtained From The Processing Of Tkemali Fruits And Our Living Environment <https://mpe.openjournals.ge/index.php/mpe/article/view/6014>, 2022;
3. Maia Vanidze, JeiranPutkaradze, Nona Surmanidze, Inga Kartsivadze, Indira Djaparidze, Aleko Kalandia/ ANTIOXIDANTS OF INTRODUCTORY AND ENDEMIC PLANTS IN GEORGIA// https://scholar.google.com/scholar?hl=en&as_sdt=0%2C5&q=Antioxidants+of+introductory+and+endemic+plants+in+georgia&btnG=20.17
4. JeiranPutkaradze, Maia Vanidze, Aleko Kalandia/ BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS OF PRUNE FRUITS AND PRODUCTS OBTAINED FROM THEM// American Chemecal Society 2022
5. JeiranPutkaradze, Maia Vanidze, Aleko Kalandia/ Chemical composition of Prunus sort «red flag» fetus and its derivative products"// გამოყენებითი ბიოტექნოლოგიის მე-2 საერთაშორისო სკოლა-სემინარი, 2019
6. ჯეირან ფუტკარაძე, მაია ვანიძე, ალექო კალანდია, რუსლან დავითაძე/ Prunus cerasifera Ehrh ზოგიერთი ველური და კულტურული ფორმის ლიპიდური ნაერთები// საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის მიერ ორგანიზებულ, აკადემიკოს გივი ცინცაძის დაბადებიდან 90 წლისადმი მიძღვნილი საერთაშორისო - სამეცნიერო- კონფერენცია „ქიმია-მიღწევები და პერსპექტივები“ 2023.

დისერტაციის მოცულობა და სტრუქტურა - დისერტაცია შედგება 118 ნაბეჭდი გვერდისაგან, დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად წარმოდგენილი დისერტაციის გაფორმების ინსტრუქციის მიხედვით და მოიცავს სატიტულო და ხელმოწერების გვერდებს, შინაარსს, სურათს 67, ცხრილის ნუსხას 20, დიაგრამას 14, სქემას 3 და გამოყენებული ლიტერატურის ნუსხას - 145 ერთეულს. ძირითადი ტექსტის შემადგენლობაშია: შესავალი, ლიტერატურული მიმოხილვა, შედეგების განსჯა, ექსპერიმენტული ნაწილი, დასკვნა და გამოყენებული ლიტერატურის ჩამონათვალი.

ლიტერატურული მიმოხილვა - ნაშრომის პირველ თავში განხილულია მცენარის შედგენილობაში შემავალი ბიოაქტიური ნაერთები, მათი ბიოსინთეზის ასპექტები და მცენარე Prunus-ის ნაყოფის ბიოაქტიური ნაერთები- ფლავონონ გლიკოზიდები, ფენოლური ნაერთების გავრცელება მცენარეებში, მათი ფიზიოლოგიური აქტივობა და დასავლეთ საქართველოში გავრცელებული ტყემლის ბიოლოგიური დახასიათება. დისერტაციას თან ახლავს გამოყენებული ლიტერატურის სია.

თავი 2. ტყემლის ნაყოფის ორგანული მჟავებისა და ნახშირწყლების HPLC-UV, IR, UPLC PDA-MS მეთოდებით კვლევა

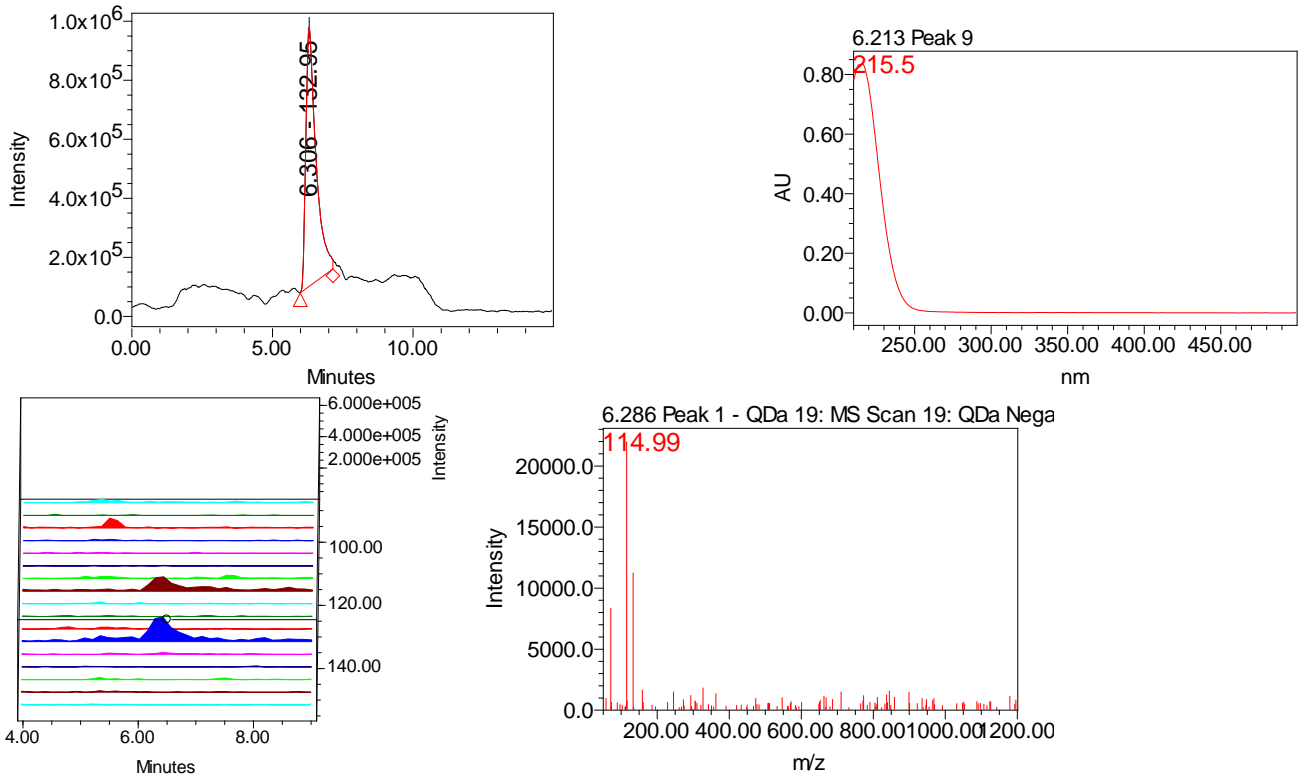
ტყემლის ნაყოფის ექსტრაქტების კონცენტრატების მყარფაზიანი ექსტრაგირებას ვახდენდით სვეტზე SPE-C18 (Waters). გააქტიურებულ სვეტში ნიმუშების შეტანის შემდეგ მიღებული ელუანტები ძირითადად შეიცავს ორგანულ მჟავებს და ნახშირწყლებს. ორგანული მჟავების იდენტიფიკაცია ჩატარდა UPLC PDA-MS ქრომატოგრაფირების მეთოდებით. გამოყენებული იქნა ანალიზური სვეტი (Phenyl 3.5 μ m, 4.6 x 150mm), გამხსნელთა სისტემა 0.1 % დეიონიზირებული წყალი, აცეტონიტრილი (Acetonitrile) გარდიენტში. რაოდენობრივი ანალიზისათვის გამოყენებული იქნა ქრომატოგრაფიული მეთოდი UV-Vis 2489 დეტექტორით. ხოლო ნახშირწყლების რაოდენობრივი შემცველობის კვლევისათვის გამოყენებული იქნა მაღალ ეფექტური სითხური ქრომატოგრაფირება (HPLC)- Waters (RI დეტექტორი, Binary HPLC Pump 1525).



სურ. 1 ტყემლის ნაყოფის ექსტრაქტების UPLC-PDA-MS სპექტრი

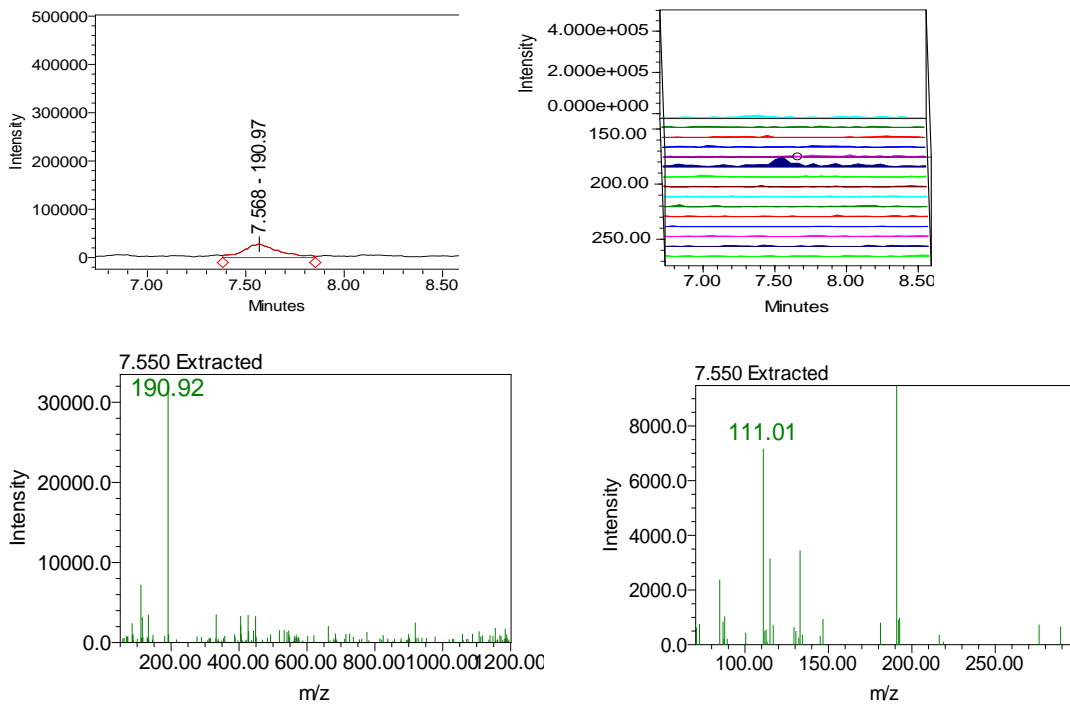
ნივთიერებათა იდენტიფიკაციისა და რაოდენობრივი ანალიზისათვის გამოყენებული იქნა ჩვენს ხელთ არსებული სტანდარტული ნაერთები (ლიმონის, ვაშლის, ღვინის მჟავები, გლუკოზა, ფრუქტოზა და საქაროზას საკალიბრო მრუდები იქნა აგებული) და ნივთიერებათა მასის <https://metlin.scripps.edu> თავისუფალი ბაზა, ასევე რეცენზირებული ლიტერატურული გამოცემების მონაცემები.

ნივთიერება 1-[M-H -] - m/z 132.93 დომინანტი ნაერთია. მისი ფრაგმენტაციის შედეგი ფსევდო ნაერთია m/z 114.99. შეკავების დრო 6.286 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV- 215.5 nm. სტანდარტულ ნაერთთან (ვაშლმჟავა Malic acids (Sigma-Aldrich) და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 1 შესაბამეა ვაშლმჟავას (Malic acids).



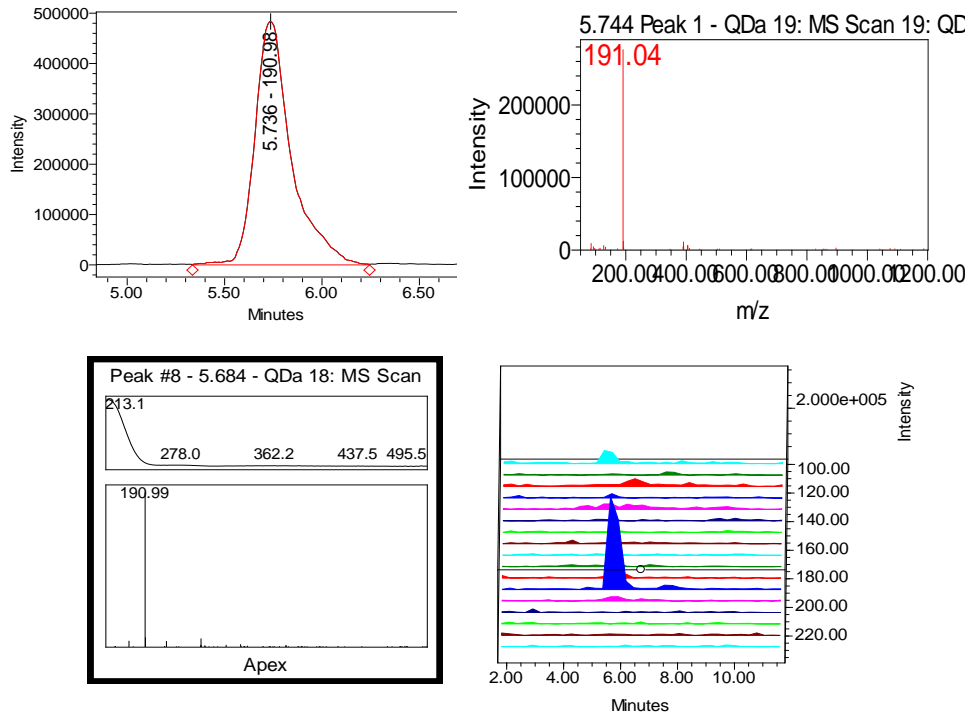
სურ. 2. ნივთიერება 1--ის UPLC-PDA-MS სპექტრი m/z 132.95

ნივთიერება 2 - [M-H⁻] - m/z 190.93 ფრაგმენტაციის შედეგი m/z 111 პიკია. შეკავების დრო 7.568 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV- 210.7 nm. სტანდარტულ ნაერთთან და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 2 შეესაბამება ლიმონის მჟავას



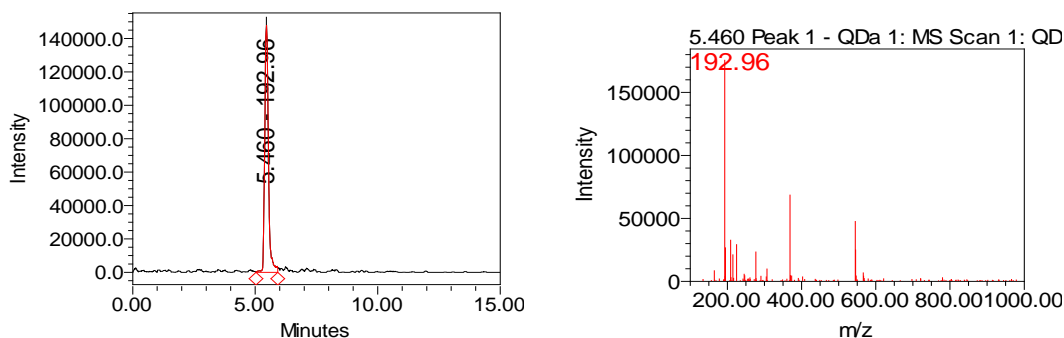
სურ. 3. ნივთიერება 2--ის UPLC-PDA-MS სპექტრი m/z 190.97

ნივთიერება 3 -[M-H -] - m/z 190.98 ფრაგმენტაციის შედეგი m/z არ ჩანს. შეკავების დრო 5.744 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV- 213.1 nm. სტანდარტულ ნაერთთან და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 3 შეესაბამება ქინაქინის მჟავას (Quinic acids) (C₇H₁₂O₆)



სურ. 4 ნივთიერება 3--ის UPLC-PDA-MS სპექტრი m/z 190.99

ნივთიერება 4 [M-H -] - m/z 192.96 ტყემლის პექტინის ჰიდროლიზის შემდგომ ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5,460, შთანთქმის მაქსიმუმი უ.ი. სპექტრში არ ჩანს. METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 4 შეესაბამება გალაქტურონის მჟავას, მოლეკულური მასით 194.14 გ / მოლი (α-D-Galacturonic acid C₆H₁₀O₇).

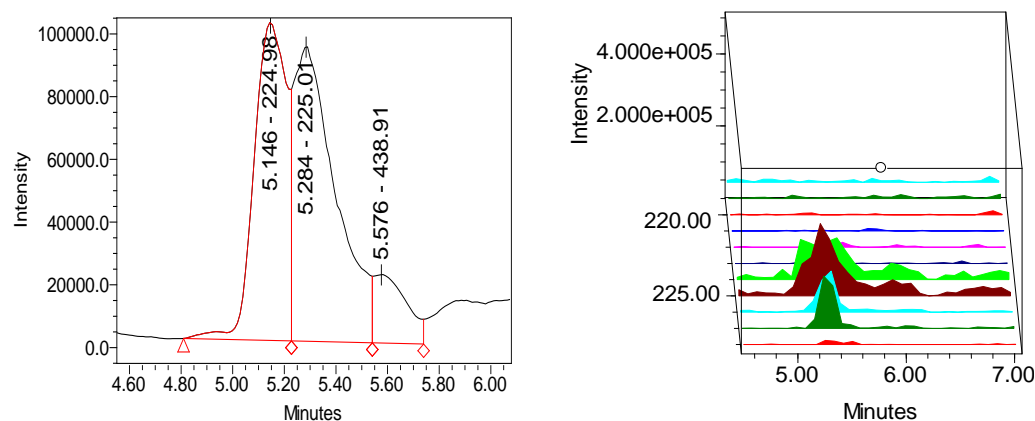


სურათი 5 ნივთიერება 3-ის UPLC-MS სპექტრი

ტყემლის წვენში იდენტიფიცირებული იქნა 4 კარბონმჟავა: ვაშლმჟავა, ქინაქინის მჟავა, ლიმონმჟავა და გალაქტურონის მჟავა.

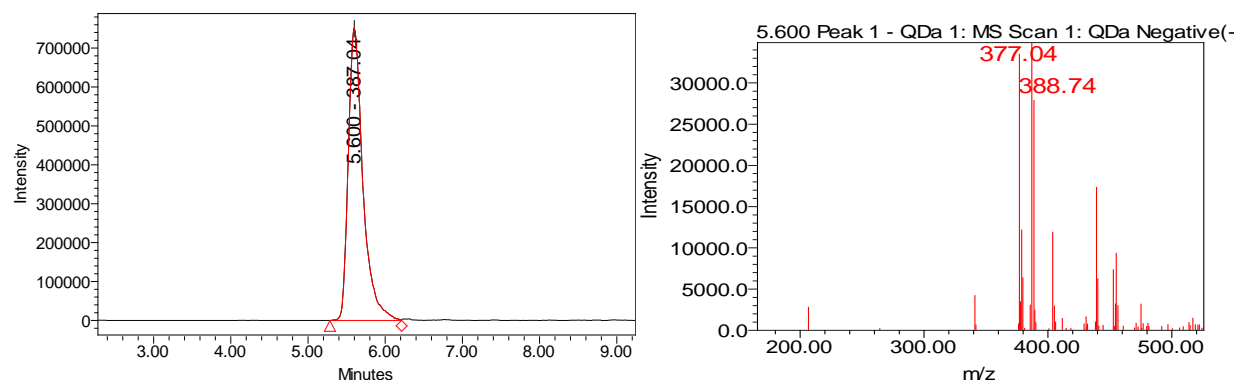
ნივთიერება 5 -[M-H -] - m/z 179.06, მაგრამ აქვე ჭიანჭველმჟავას მიერთების შედეგად წარმოიქმნება ფსევდო მოლეკულა m/z+F.A. 224.98. ქრომატოგრამაზე შეკავების დრო 5.146 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV სპექტრზე არ ჩანს. სტანდარტულ ნაერთთან და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შედარებით, ნივთიერება 5 შეესაბამება გლუკოზას.

ნივთიერება 6 -[M-H -] - m/z 178.92, მაგრამ აქვე ჭიანჭველმჟავას მიერთების შედეგად წარმოიქმნება ფსევდო მოლეკულა m/z+F.A. 225.01, ხოლო ქლორის იონთან მიერთების შედეგად წარმოიქმნება m/z+Cl 214.87. შეკავების დრო 5.284 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV სპექტრზე არ ჩანს. სტანდარტულ ნაერთთან და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 6 შეესაბამება ფრუქტოზას.



სურ. 6. ნივთიერება 5 და 6-ის UPLC-MS სპექტრი

ნივთიერება 7 -[M-H -] - m/z 341.10, მაგრამ აქვე ჭიანჭველმჟავას მიერთების შედეგად წარმოიქმნება ფსევდო მოლეკულა m/z+F.A. 387.04, ხოლო ქლორის იონთან მიერთების შედეგად წარმოიქმნება m/z+Cl 377.04. შეკავების დრო 5.600 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმი UV სპექტრზე არ ჩანს. სტანდარტულ ნაერთთან და METLIN ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 7 შეესაბამება საქაროზას.



სურ. 7 ნივთიერება 7-ის UPLC-MS სპექტრი m/z 387.04

ტყემლის წვენში იდენტიფიცირებული იქნა 3 დომინანტი ნახშირწყალი: გლუკოზა, ფრუქტოზა და საქაროზა.

ორგანული მჟავების კვლევა HPLC-ის მეთოდით

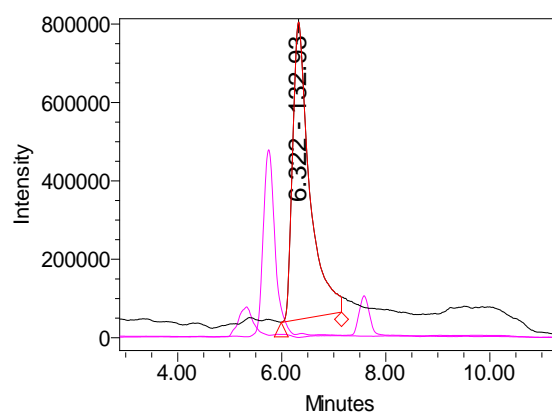
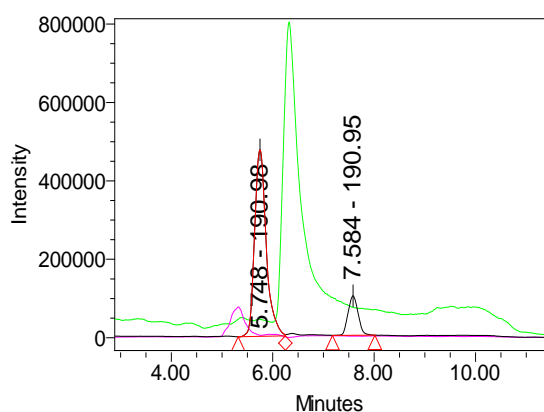
კარბომჟავების იდენტიფიკაციის შემდეგ მაღალი წნევის სითხური ქრომატოგრაფირების მეთოდით წვენებში განსაზღვრულ იქნა დომინანტი ნივთიერების ვაშლმჟავას, ასევე L-ასკორბინის მჟავას და ლიმონმჟავას შემცველობა. ქრომატოგრაფირებისათვის ნიმუშები მომზადდა შემდეგი წესით; პექტინის დასაღეკად ნაყოფის წვენს 1:1 თანაფარდობით ემატება ეთანოლი (96%-იანი). ცენტრიფუგირების შემდეგ ნიმუში 1:1 თანაფარდობით ერევა მოძრავ ფაზას-0,1% ფოსფორმჟავას. ინჯექტირებამდე ნიმუში იფილტრებოდა 0,45 მკრ ზომის ფილტრში. ქრომატოგრაფიული ანალიზი მიმდინარეობდა UV-Vis 2489 დეტექტორით L- ასკორბინის მჟავასათვის 254 ნმ-ზე, ლიმონმჟავასათვის 214 ნმ-ზე, დაყოფისათვის გამოყენებულ იქნა Shodex -ის ფორმის სვეტი - KC – 811 და მოძრავ ფაზას წარმოადგენდა 0,1% H₃PO₄. ასევე რაოდენობრივი ანალიზისათვის გამოყენებული იქნა UPLC -MS დეტექტირება.

კარბონ მჟავათა რაოდენობრივი გაანგარიშება ხორციელდება საკალიბრო მრუდის მეშვეობით, ნიმუშის მომზადებისას გამოყენებული განზავებების გათვალისწინებით.

საკალიბრო მრუდების დახასიათება

ცხრილი 2

	დასახელება	დრო	R	R ²	სტანდარტული გადახრა	განტოლება	X-axis	Y-axis	ერთ.
1	მჟაუნმჟავა	2.337	0.997572	0.995150	4.046815e+004	Y = 1.48e+007 X + 1.28e+004	Amount	Area	g/L
2	ღვინის მჟავა	2.635	0.999497	0.998994	2.405589e+004	Y = 3.46e+006 X + 9.82e+003	Amount	Area	g/L
3	ვაშლმჟავა	3.108	1.000000	1.000000	0.000000e+000	Y = 3.97e+006 X + 5.82e-011	Amount	Area	g/L
4	L-ასკორბინის მჟავა	3.446	0.999994	0.999987	4.102706e+003	Y = 2.86e+007 X + 1.67e+003	Amount	Area	g/L
5	ლიმონის მჟავა	5.130	0.999894	0.999789	6.100186e+003	Y = 2.02e+006 X + 2.49e+003	Amount	Area	g/L



სურათი 8. ტყემლის წვენის ორგანული მჟავების საერთო ქრომატოგრამა

სხვადასხვა ჯიშის ტყემლის ნაყოფის წვენში ორგანულ მჟავათა შემცველობა ცხრილი 3

ნიმუშის დასახელება	ქვინის მჟავა Quinic acid %	ლიმონმჟავა Citric acid %	ვამლმჟავა Malic acid %	ტიტრული მჟავიანობა, %
ახალციხურა. ქედა	0.78±0.023	0.01±0.0003	2.18±0.065	3.3±0.099
აჭარული ვარდისფერი. გონიო	0.64±0.020	0.03±0.0009	2.21±0.070	3.2±0.102
წითელი დროშა გონიო	0.48±0.016	0.06±0.0002	2.52±0.085	3.4±0.115
გაზაფხულის მერცხალი	1.04±0.037	0.02±0.0007	2.10±0.079	3.5±0.126
მირაბელა	0.42±0.015	0.09±0.003	2.55±0.096	3.4±0.129
წითელი დროშა.ხულო	0.53±0.021	0.03±0.001	2.32±0.092	3.2±0.112
ველური.წითელი მწვანე ფოთლით	0.78±0.023	0.01±0.0003	2.18±0.065	3.3±0.099

ჩვენს მიერ შესწავლილ ყველა შემთხვევაში ორგანულ მჟავათა საერთო რაოდენობა (ტიტრული მჟავიანობა) საკმაოდ მაღალია და 3.2 %-დან 5.5 %-მდეა. ყველა შემთხვევაში დომინანტი მჟავა ვამლმჟავაა (1.89%-დან 2.59%-მდე). ორგანული მჟავების შემცველობის მე-5-ზე მეტი ქვინის (ქინაქინის) მჟავაზე მოდის (0.8%-დან 1.06%-მდე). რაოდენობრივად ყველაზე მცირე ტყემლის ნაყოფში ლიმონის მჟავაა (0.01%-დან 0.06%-მდე).

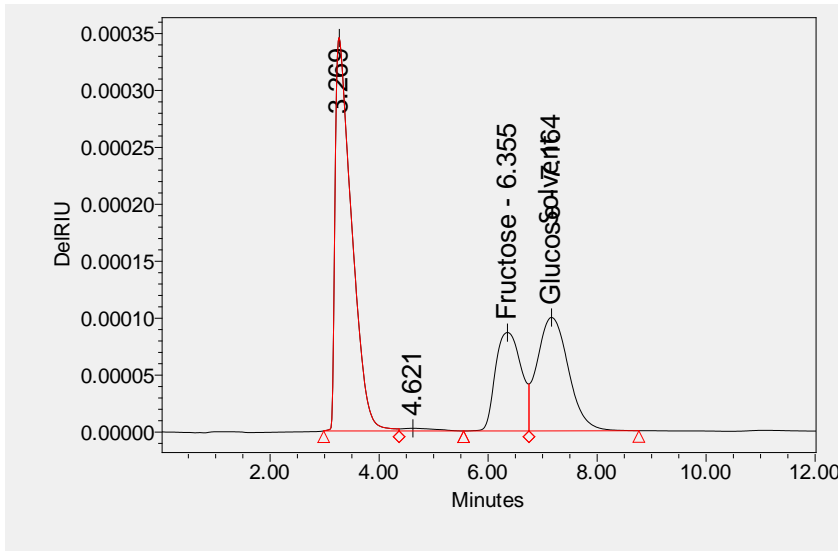
ტყემლის წვენის ნახშირწყლების კვლევა HPLC-ის მეთოდით

ნახშირწყლების რაოდენობრივი შემცველობის კვლევისათვის გამოყენებული იქნა მაღალ ეფექტური სითხური ქრომატოგრაფირება (HPLC)- Waters (RI დეტექტორი, Binary HPLC Pump 1525), ქრომატოგრაფიული სვეტი amide (250 მმ 4,5 მმ) და Carbohydrate, სვეტის ტემპერატურა 40°C ელუენტი 80 %-იანი აცეტონიტრილი (Merck; Sigma-Aldrich), დეტექტირება RI. ქრომატოგრაფირებისათვის ნიმუშები მომზადდა შემდეგი წესით; პექტინის და სხვა კოლოიდური ნაერთების დასალექად წვენს 1:1 თანაფარდობით ვამატებდით 96%-იან ეთანოლს. ცენტრიფუგირების შემდეგ ნიმუშს 1:1 თანაფარდობით ვურევდით მოძრავ ფაზას-80 %-იან აცეტონიტრილს. ინჟექტირებამდე ნიმუში იფილტრებოდა 0,45მკრ ზომის ფილტრში. ტყემლის ჯიშებში (წვენში) ნახშირწყლებიდან რაოდენობრივად განსაზღვრული იქნა დომინანტი გლუკოზა, ფრუქტოზა და საქაროზა.

ნახშირწყლების რაოდენობრივი გაანგარიშება განვახორციელეთ საკალიბრო მრუდის მეშვეობით, ნიმუშის მომზადებისას გამოყენებული განზავებების გათვალისწინებით.

ნახშირწყლების საკალიბრო მრუდების აღწერა ცხრილი 4

	Name	Time	R	R ²	Standard Error	Equation
1	Fructose	4.344	0.999791	0.999582	1.577167e+004	Y = 4.36e+005 X + 6.44e+003
2	Glucose	5.351	0.999930	0.999860	2.187388e+004	Y = 8.71e+005 X + 8.93e+003
3	Sucrose	7.236	0.999894	0.999788	2.178549e+004	Y = 8.47e+005 X + 8.89e+003
4	Maltose	8.640	0.999877	0.999753	1.705166e+004	Y = 6.14e+005 X + 6.96e+003



სურათი 9. ტყემლის წვენის ნახშირწყლების საერთო ქრომატოგრამა

ტყემლის წვენში ნახშირწყლების შემცველობა ცხრილი 5

	დასახელება	ფრუქტოზა მგ/მლ	გლუკოზა მგ/მლ	საქაროზა მგ/მლ	შაქრების ჯამი, მგ/მლ	brix
1	გაზაფხულის მერცხალი	1,4805±0.044	6,1155±0.207	0,018±0.0007	7,614±0.274	8,30±298
2	მირაბელა	1,701±0.054	6,767±0.236	0,2475±0.007	8,7155±0.305	9,6±0.336
3	აჭარული ვარდისფერი	1,5345±0.052	7,182±0.272	1,282±0.044	9,9985±0.319	10,5±0.339
4	წითელი დროშა.ხულო	0,4815±0.017	4,707±0.188	7,4115±0.281	12,6±0.453	12,7±0.406
5	წითელი დროშა გონიო	1,9035±0.072	6,29±0.201	0,774±0.024	8,9675±0.3587	9,9±0.336
6	ველური ტყემალი.გონიო	0,161±0.006	1,503±0.051	10,2735±0.359	11,9375±0.358	12,2±0.427
7	ახალციხურა	0,459±0.013	4,1895±0.150	5,534±0.199	10,1825±0.325	10,96±0.328
8	წითელი ველურ ტყემალი, ხულო	2,493±±0.079	5,497±0.208	1,7325±0.065	9,7225±0.330	10,7±0.374

ტყემლის ნაყოფში, როგორც წესი, დომინანტი ნახშირწყალი გლუკოზაა (6,7%-მდე), მისი შემცველობა თითქმის 2-ჯერ აღემატება ფრუქტოზის (2,5%-მდე) შემცველობას, ხოლო საქაროზა კი სხვადასხვა ჯიშში და ფორმაში განსხვავებულადაა. წითელფოთოლა წითელნაყოფა ჯიშებისათვის, მიუხედავად ნიმუშის ალების ადგილისა, დამახასიათებელი აღმოჩნდა საქაროზის მაღალი შემცველობა (60%-ზე მეტი).

ტყემლის ნაყოფის საერთო მჟავიანობა, ნახშირწყლები და შაქარ/მჟავა ინდექსი ცხრილი

№	ნიმუშის დასახელება მწიფე ნაყოფი	ტიტრული მჟავიანობა	ნახშირწყლების ჯამი	შაქარ/მჟავა ინდექსი
1	გაზაფხულის მერცხალი	3.2±0.096	7,614±0.228	2.38±0,11
2	ჩოხატაური, ჯვარცხმა, წითელი ტყემალი	3.5±0.112	11,412±0.365	3,27±0.16
3	მირაბელა	3.3±0.118	9,7155±0.3303	2.94±0,14
4	აჭარული ვარდისფერი	3.2±0.121	9,9985±0.349	3.12±0,15
5	წითელი დროშა, ხულო	3.4±0.129	12,6±0.453	3.70±0,18
6	წითელი დროშა, გონიო	3.3±0.132	9,9675±0.378	3.02±0,15
7	წითელი ველური ტყემალი, ხულო	3.2±0.102	11,9375±0.453	3.73±0,19
8	ახალციხურა	3.3±0.112	10,1825±0.346	3.39±0,17
9	წითელი ველური ტყემალი.ლიკანი	3.2±0.115	20,7225±0.621	6.47±0,32

კარბონ მჟავათა შემთხვევაში რაოდენობრივი თვალსაზრისით დომინანტი აღმოჩნდა ვაშლმჟავა, რომელიც ყველა შემთხვევაში ორგანულ მჟავათა მთლიანი შემცველობის 65%-ს აღემატებოდა. ქვინის მჟავას მაჩვენებელი 0,5-დან 1,0%-მდე მერყეობს. რაც შეეხება ლიმონის მჟავას ორგანულ მჟავათა საერთო რაოდენობის მხოლოდ 3-4%-მდეა და მისი შემცველობა 0,01%-დან 0,09%-მდე მერყეობს (ნედლი მასის).

ნაყოფის მნიშვნელოვანი ტექნოლოგიური მახასიათებელი შაქარ/მჟავა ინდექსი საკმაოდ დაბალია და იშვიათად აღემატება 3-ს.

თავი 2. ტყემლის ზოგიერთი ფენოლური ნაერთის UPLC PDA-MS დეტექტორით კვლევა

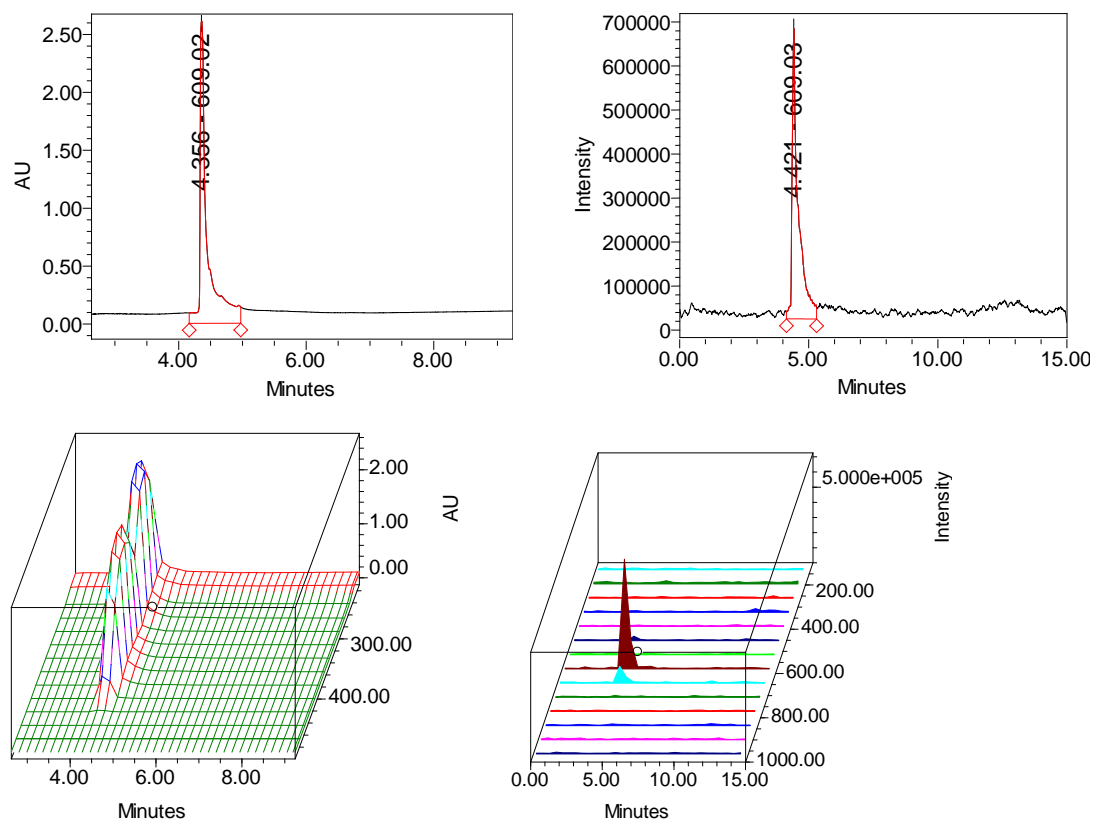
ტყემლის ნაყოფის ექსტრაქტების მომზადება ხდებოდა სქემის მიხედვით. ქრომატოგრაფიულ დაყოფამდე ვახდენდით ნიმუშის მომზადებას ქრომატოგრაფირებისათვის მყარ ფაზოვანი ექსტრაქციით (Waters), რაც მოიცავს ნიმუშის დატანას სვეტზე (SPE-C18) ნიმუშების დატანამდე ვახდენდით სვეტის აქტივაციას მეთანოლით. შემდეგ გააქტიურებულ სორბენტს ვაწონასწორებდით გამოხდილი წყლით. მხოლოდ ამის შემდეგ დაგვქონდა კატრიჯზე ნიმუში ვაკუუმის მეშვეობით. შემდეგ ეტაპზე ვახდენდით სორბენტიდან წყლით ელუირებადი ნაერთების მიღებას და საჭიროების შემთხვევაში კონცენტრირებას. არა ანტოციანური ფენოლური ნაერთების ელუირებას ვახდენდით ეთილაცეტატით (შემდგომი კონცენტრირება ვაკუუმში ამოშრობამდე) და ანტოციანების ელუირებას 0.1%-იანი მარილმჟავათი შემჟავებული მეთანოლით. ინდივიდუალური ნაერთების გამოსაყოფად გამოყენებული იქნა სვეტის და მაღალეფექტური პრეპარატიული სვეტით ქრომატოგრაფირება (Waters C18 10 მმ x 250 მმ) ულტრაიისფერი და ხილული არის დეტექტირებით. ინდივიდუალური ნაერთების იდენტიფიკაცია კი ხდებოდა ულტრა ეფექტური სითხური ქრომატოგრაფირებით (UPLC)

ფოტოდოდური მატრიცის (PDA) და მას (MS) დეტექტორებით. ნაერთების რაოდენობრივ ანალიზს ვატარებდით UPLC-PDA-MS, HPLC-UV, Vis დეტექტირების გამოყენებით.

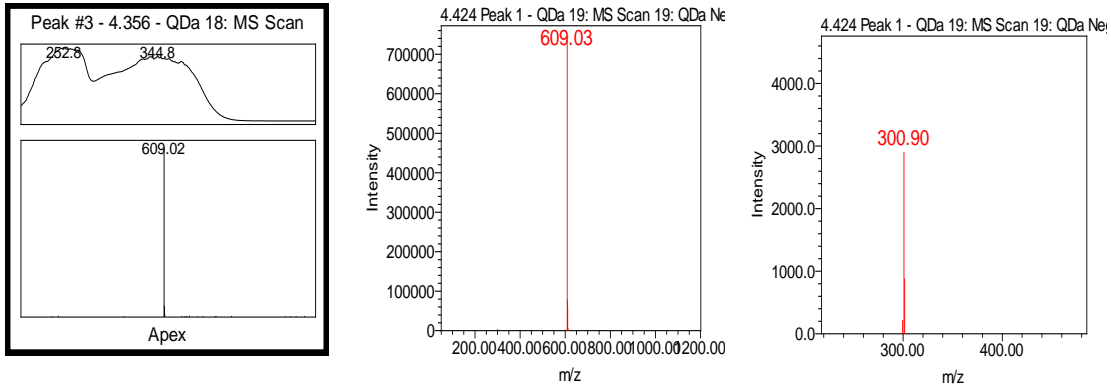
ნაერთების იდენტიფიკაციისათვის მნიშვნელოვანია მათი ფრაგმენტაცია და ასევე მათი მასების ცვლილება (იონთა მიმატების ხარჯზე) და შთანთქმის მაქსიმუმების მნიშვნელობა UV არეში.

ნივთიერებათა იდენტიფიკაციისა და რაოდენობრივი ანალიზისათვის გამოყენებული იქნა ჩვენს ხელთ არსებული სტანდარტული ნაერთები (რუთინი და ქლოროგენის მჟავა-Sigma-Aldrich) და ნივთიერებათა მასის <https://metlin.scripps.edu> თავისუფალი ბაზა, ასევე რეცენზირებული ლიტერატურული გამოცემების მონაცემები. შესაძლებელი გახდა რამდენიმე ნაერთის იდენტიფიკაცია.

სურათი: სტანდარტული რუთინის UPLC-PDA-MS სპექტრი

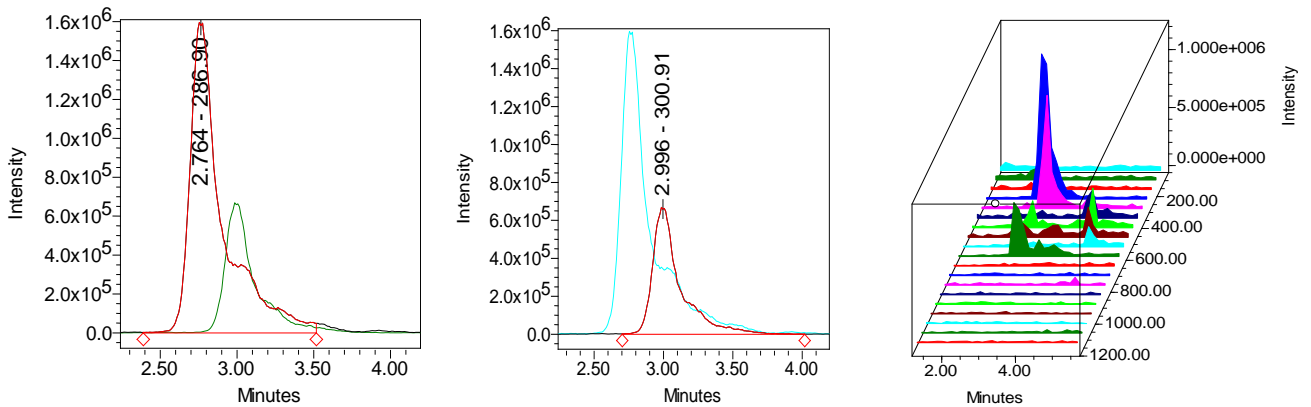


სურათი 10. სტანდარტული რუთინის UPLC-PDA-MS საერთო ქრომატოგრამები და მათი 3D ფორმატი

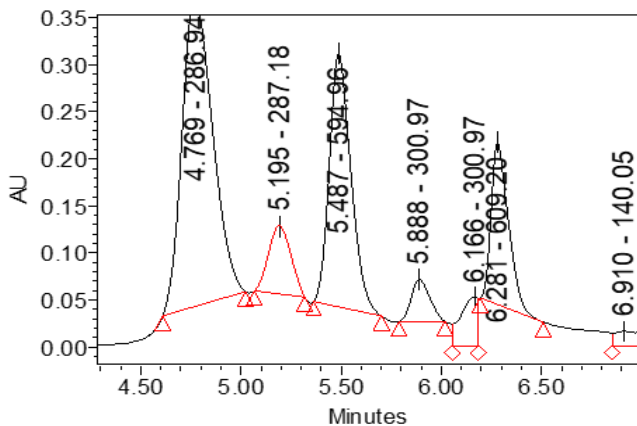


სურათი 11. სტანდარტული რუთინის UPLC-PDA-MS λ_{max} -344.8; M/Z (M-H) 609.03 (fr 300.9).

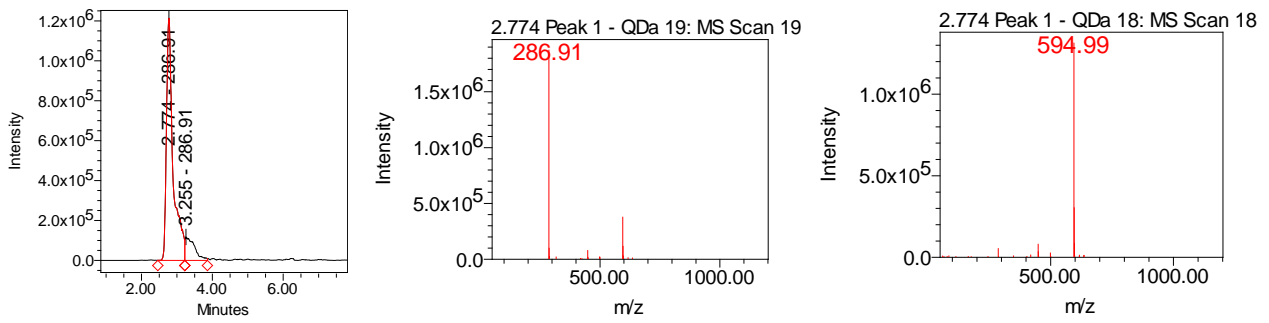
ქრომატოგრამაზე (სურ.11) სულ მცირე 3 დომინანტი ნაერთი და 3 თანაური ნაერთი ჩანს. ნაერთების იდენტიფიკაციის ჩატარებამდე მოვახდინეთ დომინანტი ნაერთების გამოსაყოფად ქრომატოგრაფირება HPLC -UV-Vis მეთოდით პრეპარატიული სვეტების (Waters C18 10X250 mm 5.0 μ m) გამოყენებით. მიღებული იქნა 3 ძირითადი ნაერთების ფრაქცია, რომელთა ქრომატოგრაფირება დადებითი იონიზაციით 2 დომინანტ ნაერთს აგლიკონებს M/Z (M+H)-286.90 და M/Z (M+H) 300.91 გვაძლევს (სურ.12)



სურათი 12. ფრაქცია 3 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

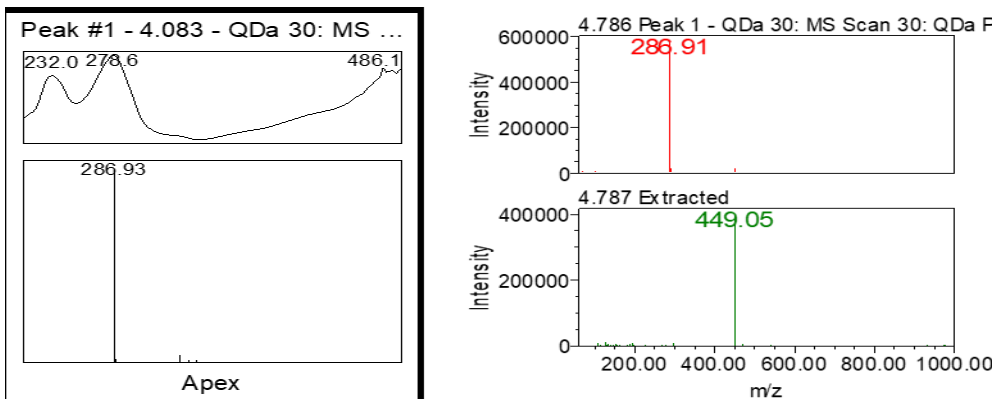


სურათი 13. ფრაქცია 3 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).



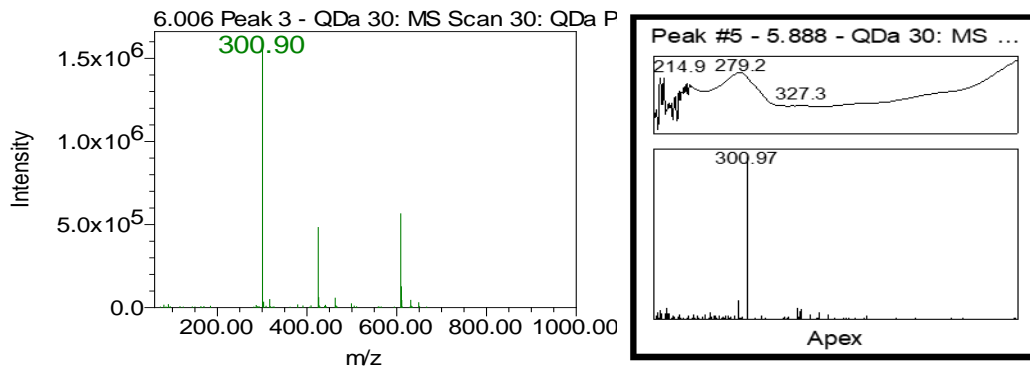
სურათი 14. ფრაქცია 3 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

ნივთიერება 8 [M+H] - m/z 289.90 (M-H-284.91) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 2.764, შთანთქმის მაქსიმუმით 279.8 ნმ და 500ნმ-ზე მეტი (სამწუხაროდ PDA ვერ უზრუნველყოფს 500 ნმ-ზე მეტ ჩვენებას, მაგრამ გამოყენებული იქნა ფრაქციათა სკანირება სპექტროფოტომეტრზე (Mettled Toledo UV 5 Bio), სადაც ჩვენება 519 ნმ. სხვა შემთხვევებშიც ნაჩვენებია იქნება ამ გზით მიღებული შედეგები). მიღებული შედეგების, ასევე METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 8 შეესაბამება ციანიდინს, მოლეკულური მასით 287.24 გ / მოლი (1-Benzopyrylium, 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-, chloride; 2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-1-benzopyrylium) ($C_{15}H_{11}O_6$).



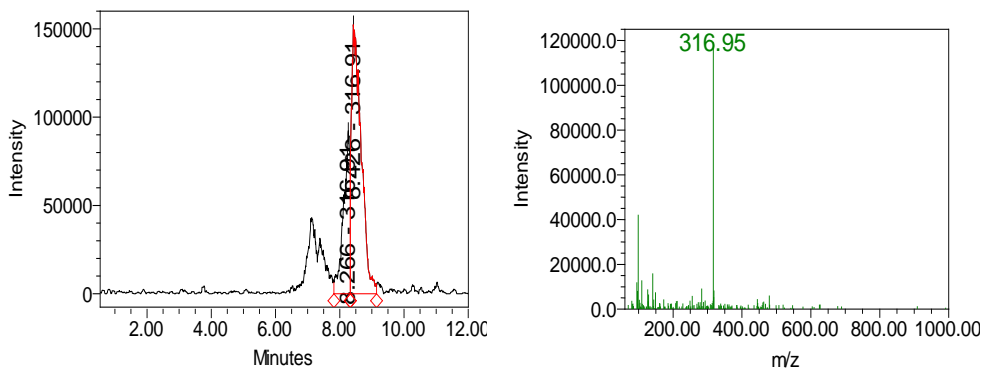
სურ15. UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

ნივთიერება 9 [M+H] - m/z 300.91 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 2.764წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282,9ნმ და 518.3ნმ. მიღებული შედეგების, ასევე METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 9 შეესაბამება პეონიდინს, მოლეკულური მასით MW: 301.27გ/მოლი (2-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)chromenylium-3,5,7-triol) ($C_{16}H_{13}O_6^+$).



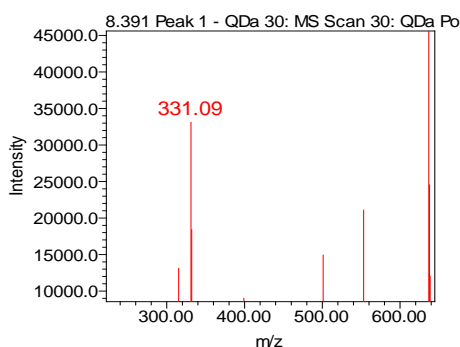
სურ. 16. UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

ნივთიერება 10 [M+H] - m/z 316.95 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 8.511წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282,85მ და 518.3 ნმ. მიღებული შედეგების, ასევე METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 10 შეესაბამება პეტუნიდინს, მოლეკულური მასით MW: 317.065 გ/მოლი (2-(3,4-Dihydroxy-5-methoxyphenyl)-3,5,7-trihydroxychromenium) (C₁₆H₁₃O₇).



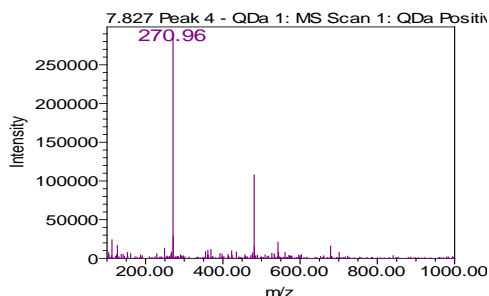
სურ.17. UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

ნივთიერება 11. [M+H] - m/z 331.95 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 8.391 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282,75მ და 518.45მ. მიღებული შედეგების, ასევე METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 10 შეესაბამება პეტუნიდინს, მოლეკულური მასით MW: 331.081 გ/მოლი (2-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)chromenylium-3,5,7-triol) (C₁₇H₁₃O₇).



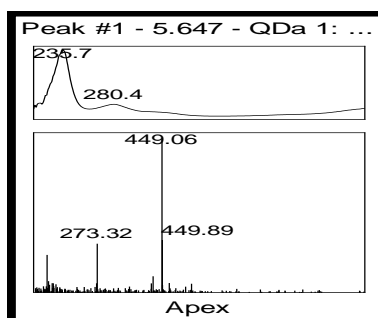
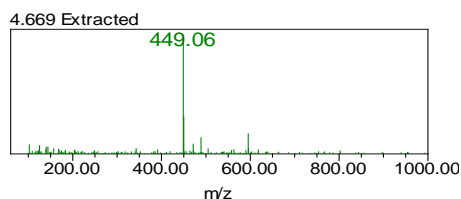
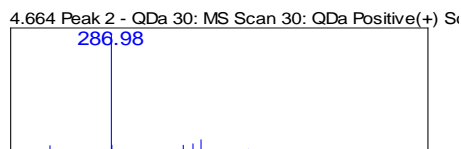
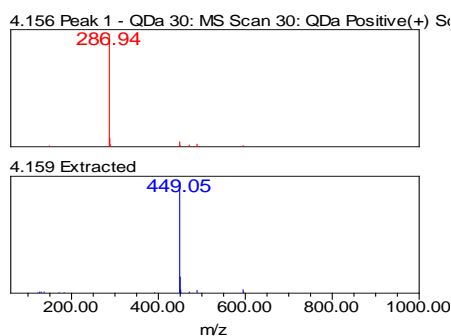
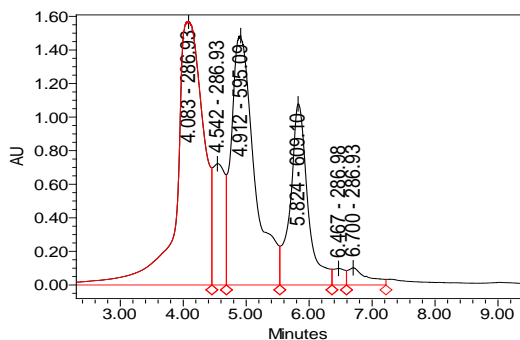
სურ. 18. UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

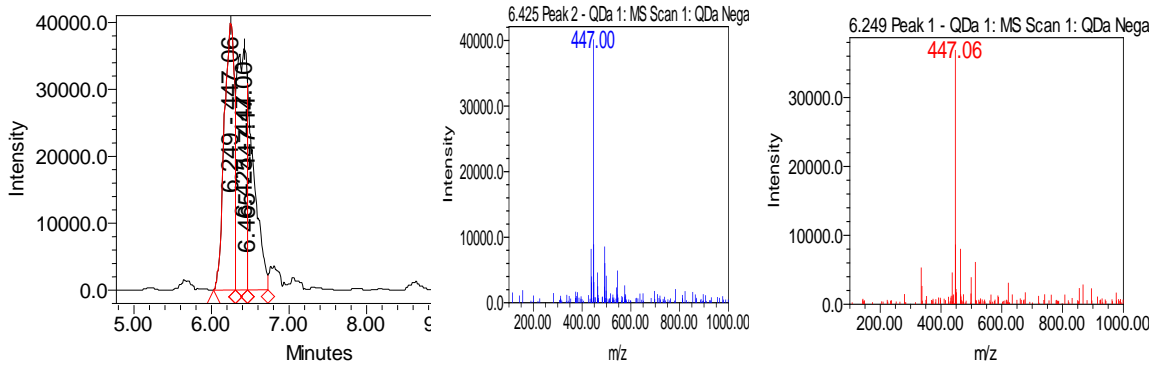
ნივთიერება 12 [M+H] - m/z 331.95 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 8.391 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282,75მ და 518.4 ნმ,მიღებული შედეგების, ასევე METLIN (<https://metlin.scripps.edu>) ნაერთების მასების ბაზის შესაბამისად ნივთიერება 10 შეესაბამება პეტუნიდინს, მოლეკულური მასით MW: 271.06 გ/მოლი (2-(4-hydroxyphenyl)chromene-3,5,7-triol) (C₁₅H₁₁O₅).



სურ. 19. UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H).

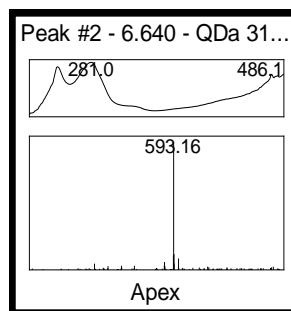
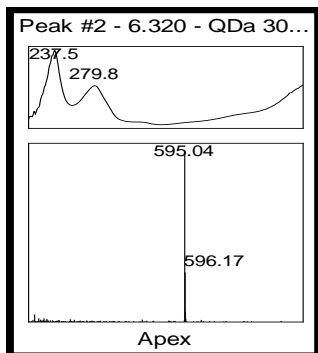
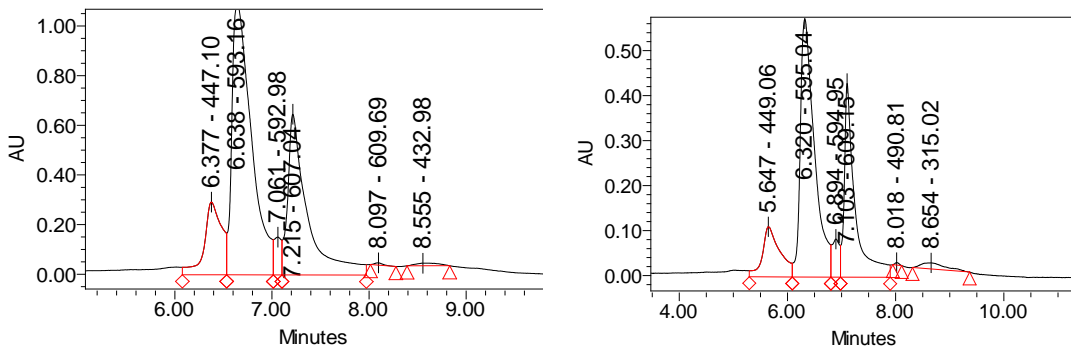
ნივთიერება 13,14 [M+H] - m/z 449.08 (447.10) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე სულ მცირე 2 ნაერთი შეკავების დროით 5.700 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 279.85მ და 518 ნმ. ფრაგმენტაციის შედეგად მიიღება m/z 286.92 (ციანიდინი). მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 13 შეესაბამება ციანიდინ-3-0-გალაქტოზიდს, მოლეკულური მასით MW: 449.4გ/მოლი, [C₂₁H₂₁O₁₁⁺](#) Cyanidin 3-O-galactoside (2*S*,3*R*,4*S*,5*R*,6*R*)-2-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxychromenyl-3-yl]oxy-6-(hydroxymethyl) oxane-3,4,5-triol). ხოლო ნივთიერება 14 შეესაბამება ციანიდინ-3-0-გლუკოზიდი მოლეკულური მასით MW: 449.4გ/მოლი, [C₂₁H₂₁O₁₁⁺](#) Cyanidin 3-O-glucoside (2*S*,3*R*,4*S*,5*R*,6*R*)-2-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-chromen-3-yl]oxy-6-(hydroxymethyl)oxane-3,4,5-triol.

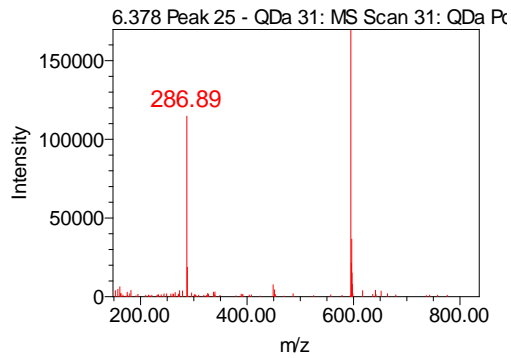
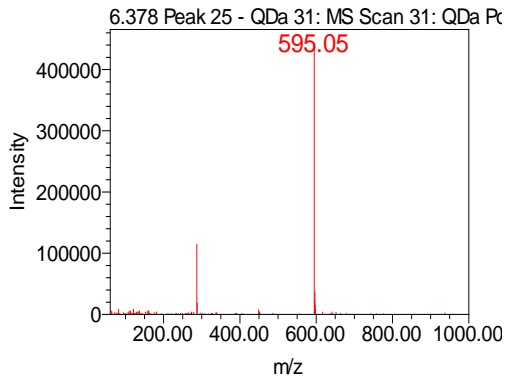




სურათი 20. ნივთიერება 13 და 14-ის UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H) და M/Z (M-H).

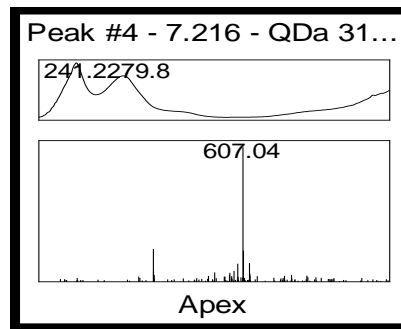
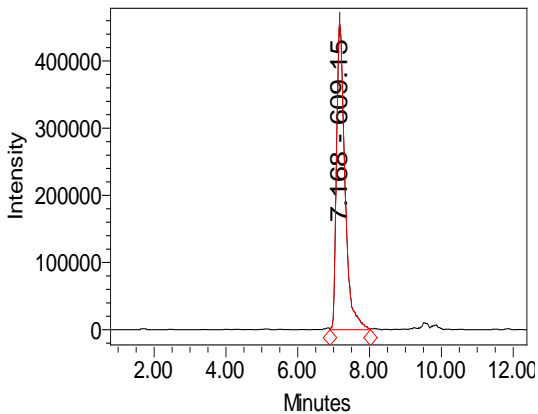
ნივთიერება 15;16 [M+H]⁺ - m/z 595.04 (593.16) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 6.320 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 279.8ნმ და 518ნმ. ფრაგმენტაციის შედეგად მიიღება m/z 286.89 (ციანიდინი). მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 15 შეესაბამება ციანიდინ-3-0-რუთინოზიდს, მოლეკულური მასით MW: 595.5 გ/მოლი, $C_{27}H_{31}O_{15}^+$ Cyanidin 3-O-rutinoside ((2R,3R,4R,5R,6S)-2-[[[(2R,3S,4S,5R,6S)-6-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxychromenylium-3-yl]oxy-3,4,5-trihydroxyoxan-2-yl]methoxy]-6-methyloxane-3,4,5-triol]); ნივთიერება 16 Cyanidin-3-(6-trans-pcoumaroyl)glucoside MW: 595.5 m/mol, $C_{30}H_{27}O_{13}^+$ (2R,3S,4S,5R,6S)-6-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxychromenylium-3-yl]oxy-3,4,5-trihydroxyoxan-2-yl)methyl (E)-3-(4-hydroxyphenyl)prop-2-enoate.



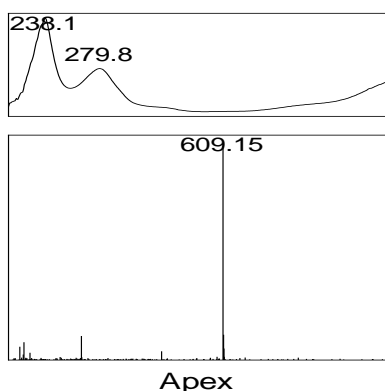


სურათი 21. ნივთიერება 15 და 16-ის UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H) და M/Z (M-H).

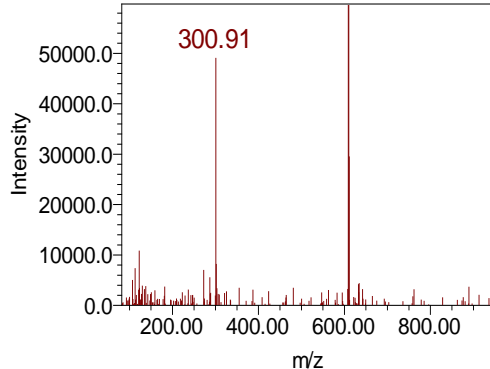
ნივთიერება 17 [M+H] - m/z 609.15 (607.04) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 7.103 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 279.8 ნმ და 518 ნმ. ფრაგმენტაციის შედეგად მიიღება m/z 300.91 (პეონიდინი). მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 16 შეესაბამება პეონიდინ-3-0-რუთინოზიდს, მოლეკულური მასით MW: 609.6 გ/მოლი, C₂₈H₃₃O₁₅⁺ Peonidin 3-rutinoside ((2*R*,4*S*,5*R*)-2-[[*(3*S*,6*S*)-6-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)chromenylium-3-yl]oxy-3,4,5-trihydroxyoxan-2-yl]methoxy]-6-methyloxane-3,4,5-triol)*



Peak #4 - 7.103 - QDa 1: ...

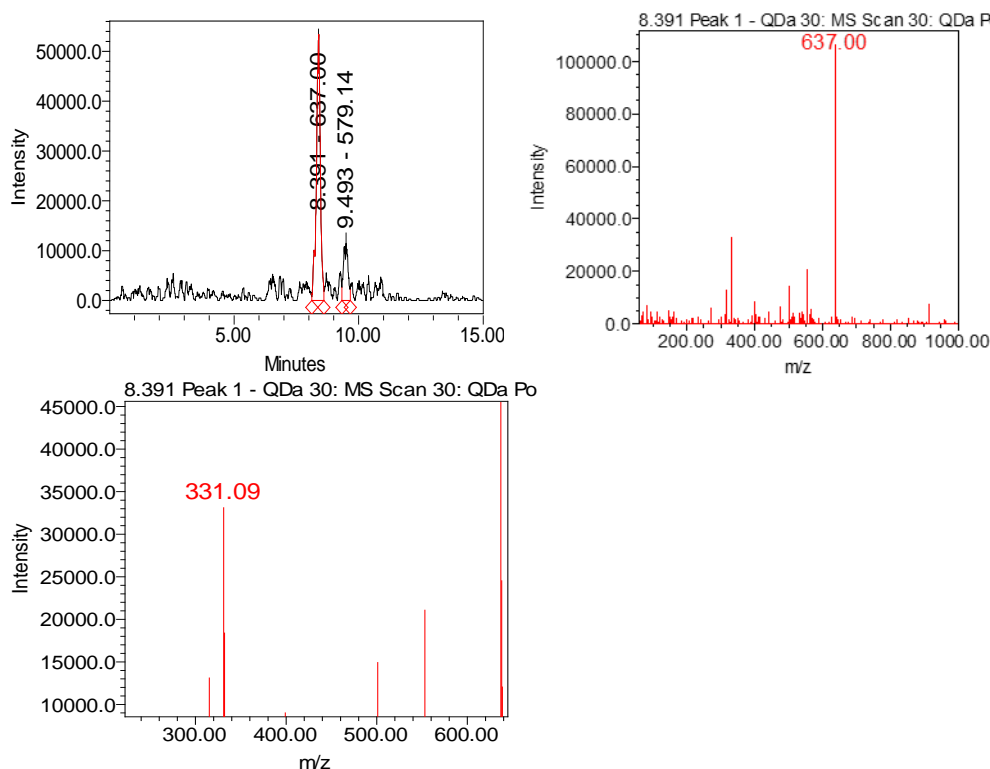


7.291 Peak 6 - QDa 31: MS Scan 31: QDa Po



სურათი 22. ნივთიერება 17-ის UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H) და M/Z (M-H)

ნივთიერება 18 [M+H] - m/z 637.00 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 8.391 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 279.8 ნმ და 518 ნმ. ფრაგმენტაციის შედეგად მიიღება m/z 331.09 (მალვიდინი). მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 17 შეესაბამება მალვიდინ-3-0-პარაკუმაროილ გლუკოზიდს, მოლეკულური მასით MW: 639.6 გ/მოლი, $C_{32}H_{31}O_{14}^+$ Malvidin-3-O-(6-p-coumaroyl)glucoside ((2*S*,3*R*,4*R*,5*S*,6*R*)-6-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)chromenylium-3-yl]oxy-3,4,5-trihydroxyoxan-2-yl)methyl (*E*)-3-(4-hydroxyphenyl)prop-2-enoate).



სურათი 23. ნივთიერება 18-ის UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M+H) და M/Z (M-H)

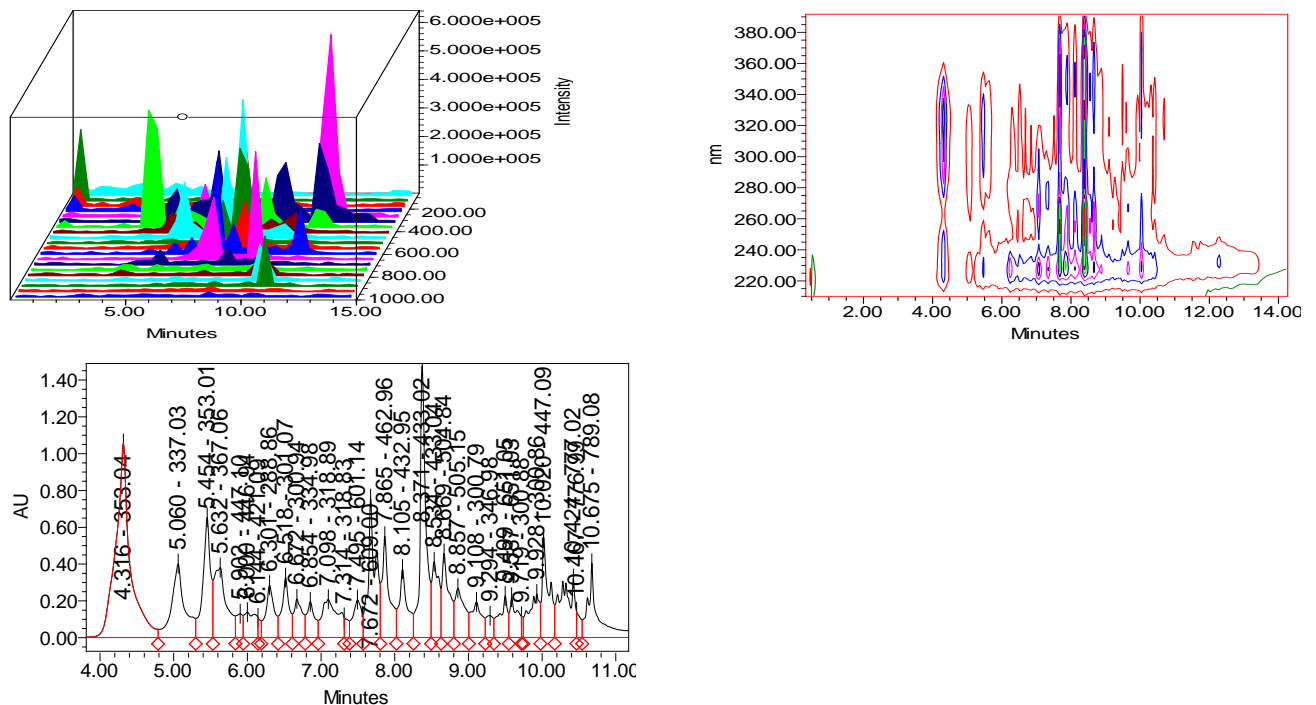
ფლავონონ გლიკოზიდების LC-MS-PDA კვლევაში საშუალება მოგვცა მოგვეხდინა შემდეგი ნაერთების იდენტიფიკაცია:

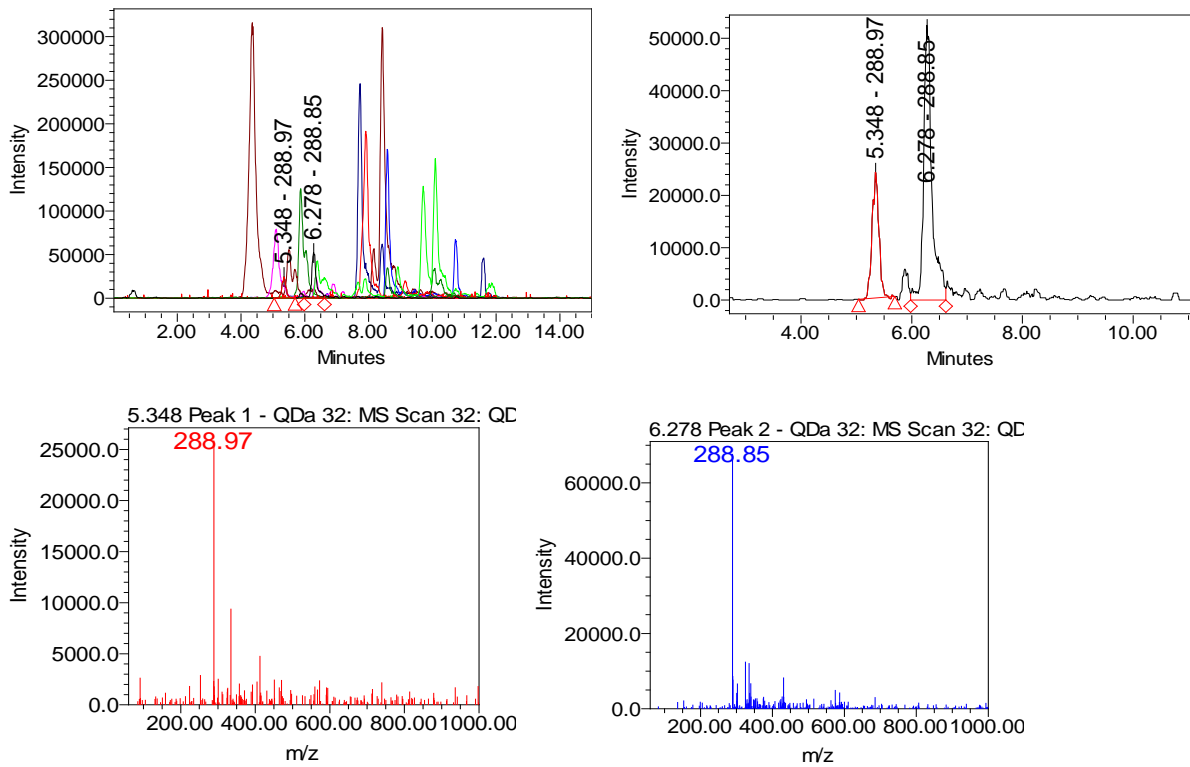
ტყემლის ნაყოფის ანტოციანიდინების UPLC-PDA-MS დახასიათება ცხრილი N7

#	Compound name	RT (min)	მოლეკულური ფორმულა	[M-H] ⁺ (m/z)	ფრაგმენტი	UV max. (nm)
8	ციანიდინი	2.764	C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺	289.90		279.8; 519
9	პეონიდინი	6.006	C ₁₆ H ₁₃ O ₆ ⁺	300.91		282,9;518.3
10	პეტუნიდინი	8.511	C ₁₆ H ₁₃ O ₇	316.95		282,8;518.3
11	მალვიდინი	8.391	C ₁₇ H ₁₅ O ₇	331.95		282,7;518.4
12	პელარგონიდინი	7.827	C ₁₅ H ₁₁ O ₅	270.96		
13	ციანიდინ-3-0-გალაქტოზიდი	6.229	C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁺	449.08	286.98	279.8;518

14	ციანიდინ-3-0- გლუკოზიდი	6.425	C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁺	449.4	286.98	279.8;518
15	ციანიდინ-3-0- რუთინოზიდი	6.320	C ₂₇ H ₃₁ O ₁₅ ⁺	595.04	286.98	279.8;518
16	ციანიდინ-3-(6-trans- p კუმაროილ) გლუკოზიდი	6.894	<u>C₃₀H₂₇O₁₃⁺</u>	594.95	286.98	279.8;518
17	პეონიდინ-3-0- რუთინოზიდი	7.103	C ₂₈ H ₃₃ O ₁₅ ⁺	609.15	300.91	279.8;518
18	მალვიდინ-3-0-პარა- კუმაროლ- გლუკოზიდი	8.391	<u>C₃₂H₃₁O₁₄⁺</u>	637.00	331.09	279.8; 518

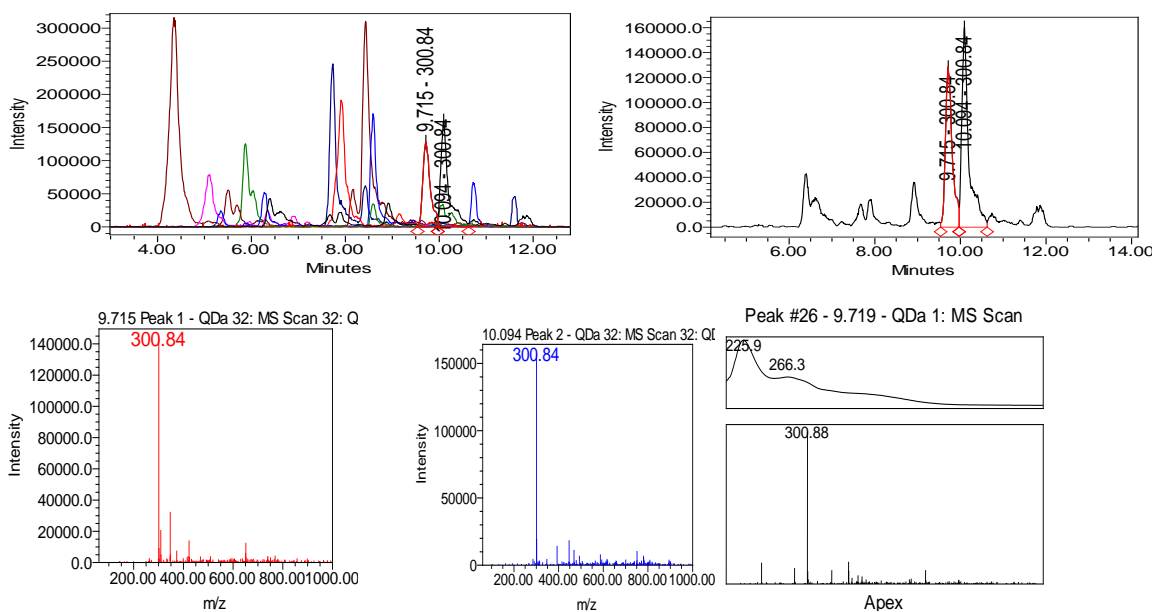
ტყემლის ნაყოფის ფენოლკარბონმჟავების და ფლავონოიდური გლიკოზიდების იდენტიფიკაციისათვის გამოყენებული იქნა მთლიანი ნაყოფის სპირტიანი ექსტრაქტის ეთილაცეტატიანი ფრაქციები. დეტექტირება ხდებოდა როგორც უარყოფითი (ESI-MS)⁻, ასევე დადებითი (ESI-MS)⁺ იონიზაციის პირობებში.





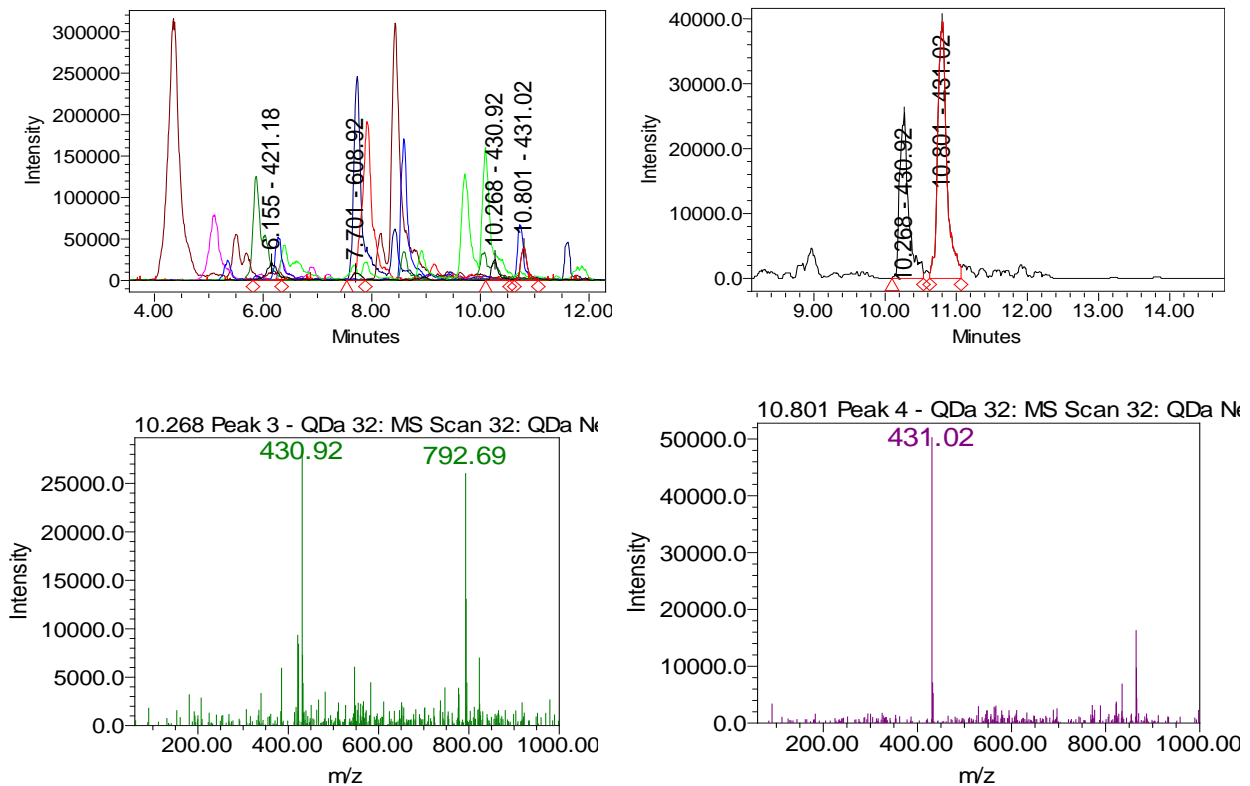
სურათი 25. ნივთიერება 19,20 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 21;22 [M-H] - m/z 300.84 და 300.84 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 9.715წთ და 10.094 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 266.3ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 21 შესაბამეა კვერცეტინს, MF: $C_{15}H_{10}O_7$ MW: 302.23გ/მოლი, IUPAC Name: 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxychromen-4-one, ხოლო ნივთიერება 22 არაა იდენტიფიცირებული.



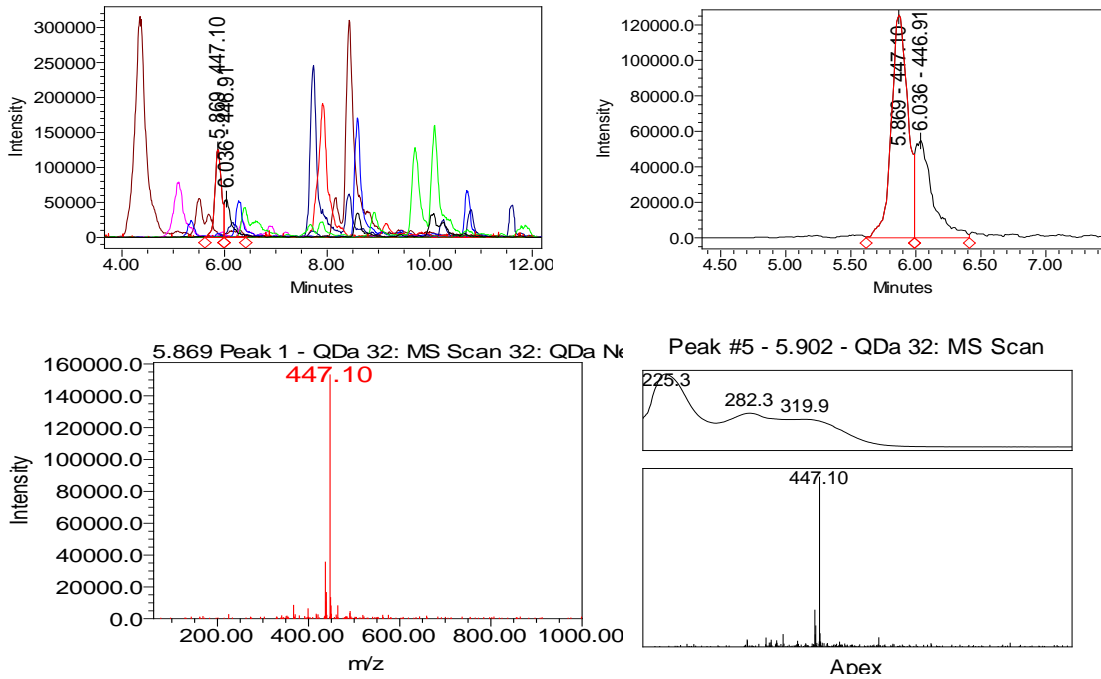
სურათი 26. ნივთიერება 21,22 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 23;24 [M-H] - m/z 430.92 და 431.02 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 10.268წთ და 10.801 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 266.35მ მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 22 შეესაბამება აპიგენინ 7--გლუკოზიდის (Apigenin 7-0-glucoside). MF: $C_{21}H_{20}O_{10}$ MW: 432.4 გ/მოლი, IUPAC Name:(5-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-7-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxychromen-4-one, ხოლო ნივთიერება 24 არაა იდენტიფიცირებული.



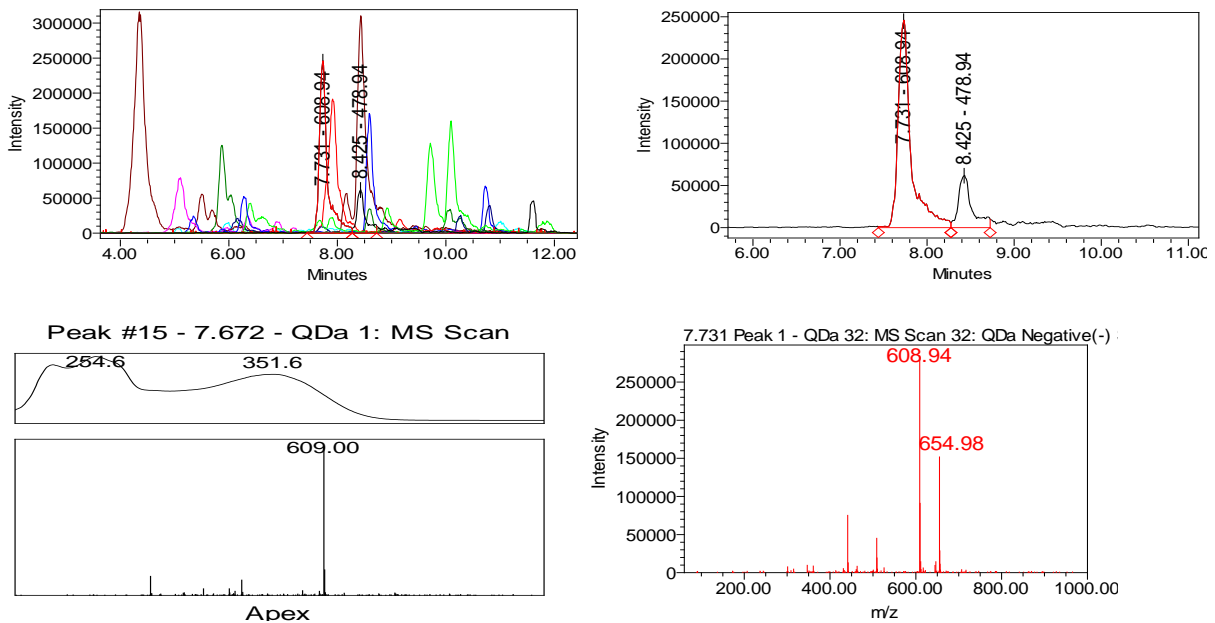
სურათი 27. ნივთიერება 23;24 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 25;26 [M-H] - m/z 447.10 და 446.91 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.869წთ და 6.036 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282.35მ და 319.9 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 24 შეესაბამება ლუტეოლინ-7-გლუკოზიდს. Luteolin 7-O-glucoside MF: $C_{21}H_{20}O_{11}$ MW: 448.4 გ/მოლი, IUPAC Name: 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5-hydroxy-7-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxychromen-4-one. ნივთიერება 25 არაა იდენტიფიცირებული.



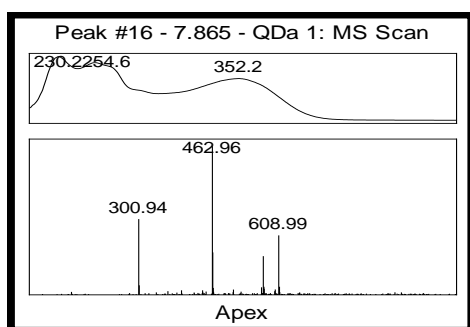
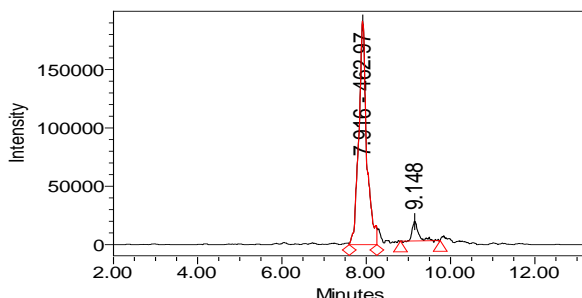
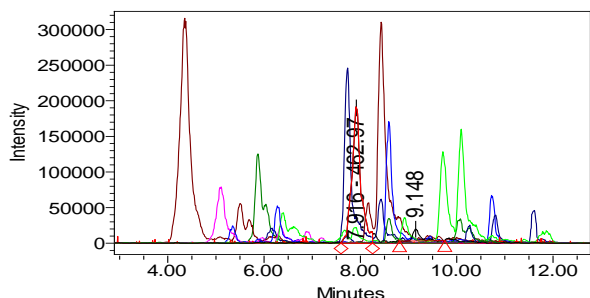
სურათი 28. ნივთიერება 25;26 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 27 [M-H] - m/z 608.94 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 7.731 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 254.6 ნმ და 351.6 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 27 შეესაბამება რუტინს (კვერცეტინ-3-რუტინოზიდი) (Quercetin 3-rutinoside) MF: $C_{27}H_{30}O_{16}$ MW: 610.5გ/მოლი, IUPAC Name: 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-3-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-[(2R,3R,4R,5R,6S)-3,4,5-trihydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxymethyl]oxan-2-yl]oxychromen-4-one.



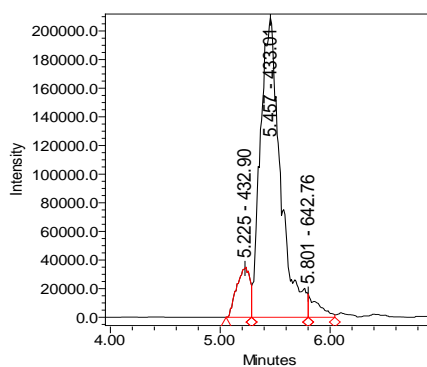
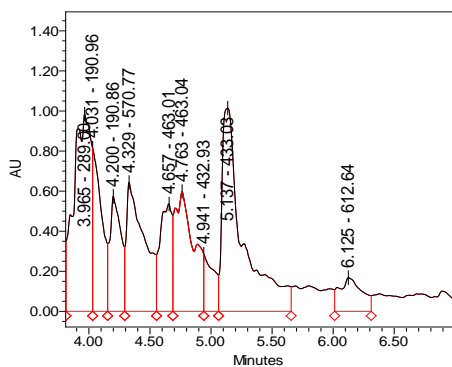
სურათი 29. ნივთიერება 27 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

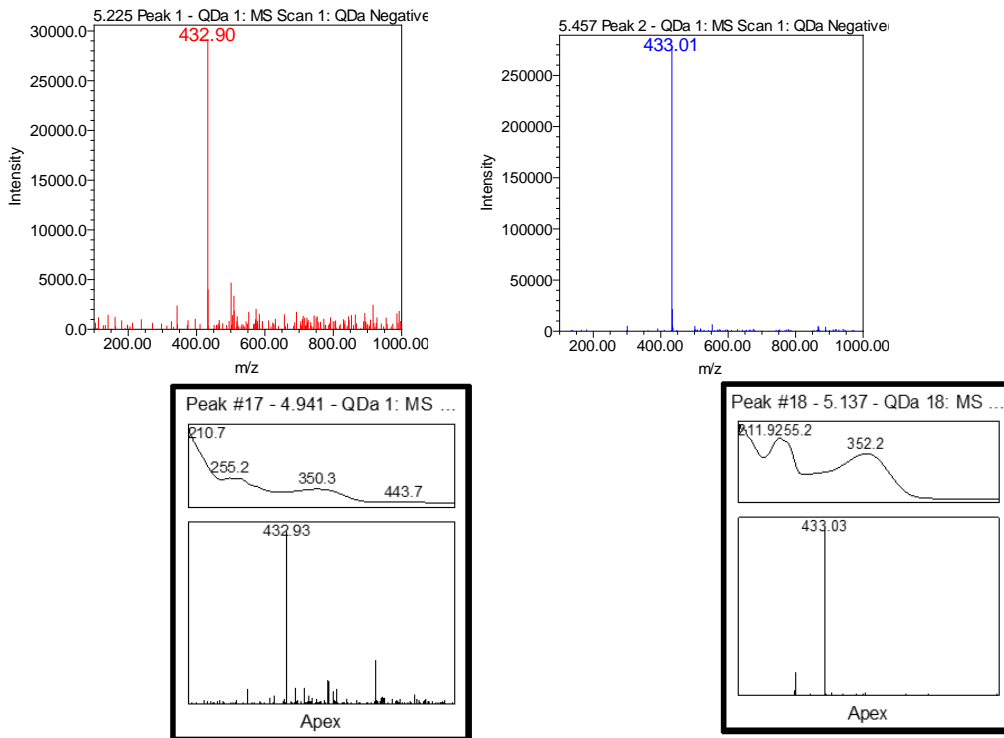
ნივთიერება 28 [M-H] - m/z 462.97 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 7.916 წთ, ფრაგმენტის m/z 300.94 შთანთქმის მაქსიმუმით 254.6 ნმ და 352.25მ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 27 შეესაბამება კვერცეტინ-3-O-გლუკოზიდს, MF: $C_{21}H_{20}O_{12}$ MW: 464.4გ/მოლი, IUPAC Name: 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-3-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxychromen-4-one.



სურათი 30. ნივთიერება 28 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

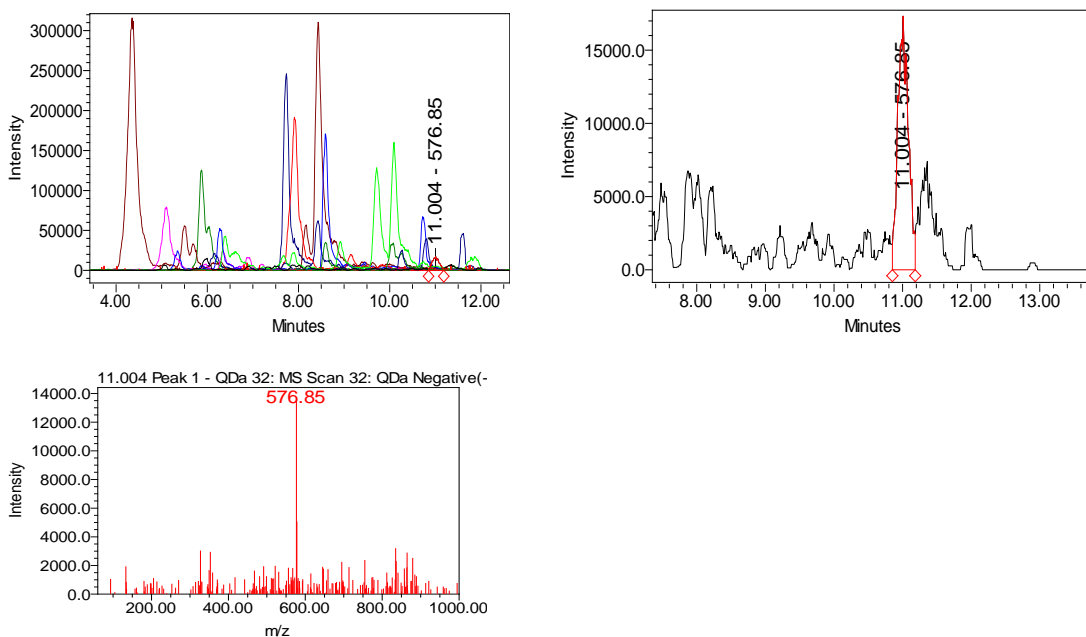
ნივთიერება 29;30 [M-H] - m/z 432.96 და 478.94 (432.96) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 8.164წთ და 8.431 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 253.46მ და 352.2 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 28 შეესაბამება კვერცეტინ-3-O არაბინოზიდს, (quercetin-3-O-arabinoside) MF: $C_{20}H_{18}O_{11}$ MW: 434.3გ/mol, IUPAC Name: 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-3-[(2R,3S,4R,5R)-3,4,5-trihydroxyoxan-yl] oxychromen-4-one.





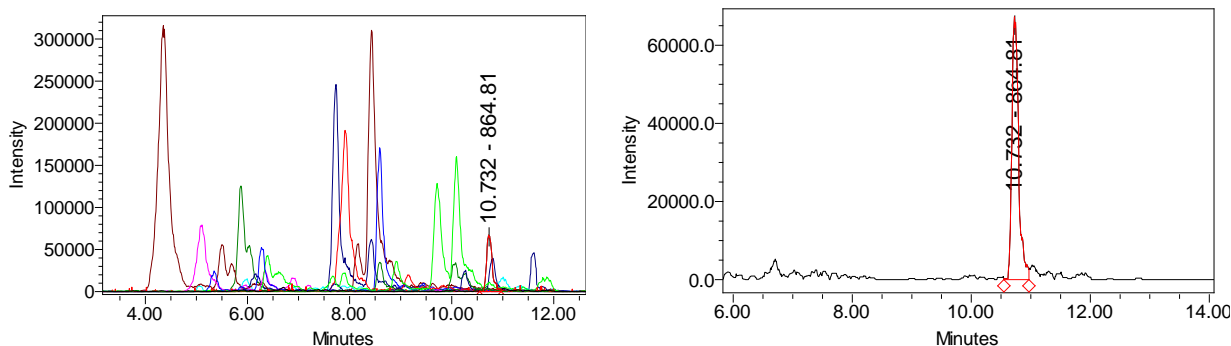
სურათი 31. ნივთიერება 29;30 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 31 [M-H] - m/z 576.85 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 11.004 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 278ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 30 შესაბამება პროციანიდინ B1, (Procyanidin B1) MF: $C_{30}H_{26}O_{12}$ MW: 578.5გ/მოლი, IUPAC Name: (2R,3S)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-8-[(2R,3R,4R)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-3,4-dihydro-2H-chromen-4-yl]-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-triol.



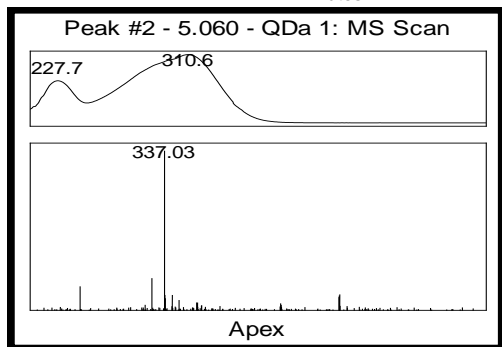
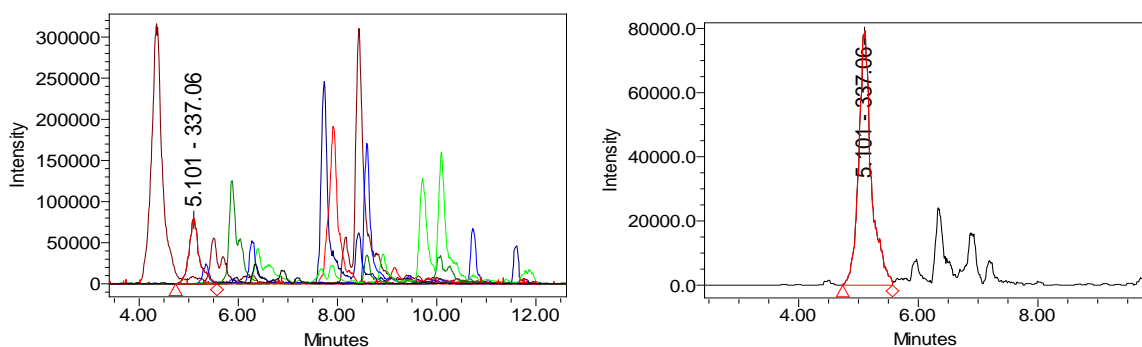
სურათი 32. ნივთიერება 31 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 32 [M-H] - m/z 864.81 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 10.732 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 276.3 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 31 შეესაბამება პროციანიდინ C1, (Procyanidin C1) MF: C₄₅H₃₈O₁₈ MW: 866.8გ/მოლი, IUPAC Name: 2R,3R,4S)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-4-[(2R,3R)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-3,4-dihydro-2H-chromen-8-yl]-8-[(2R,3R,4R)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-3,4-dihydro-2H-chromen-4-yl]-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-triol.



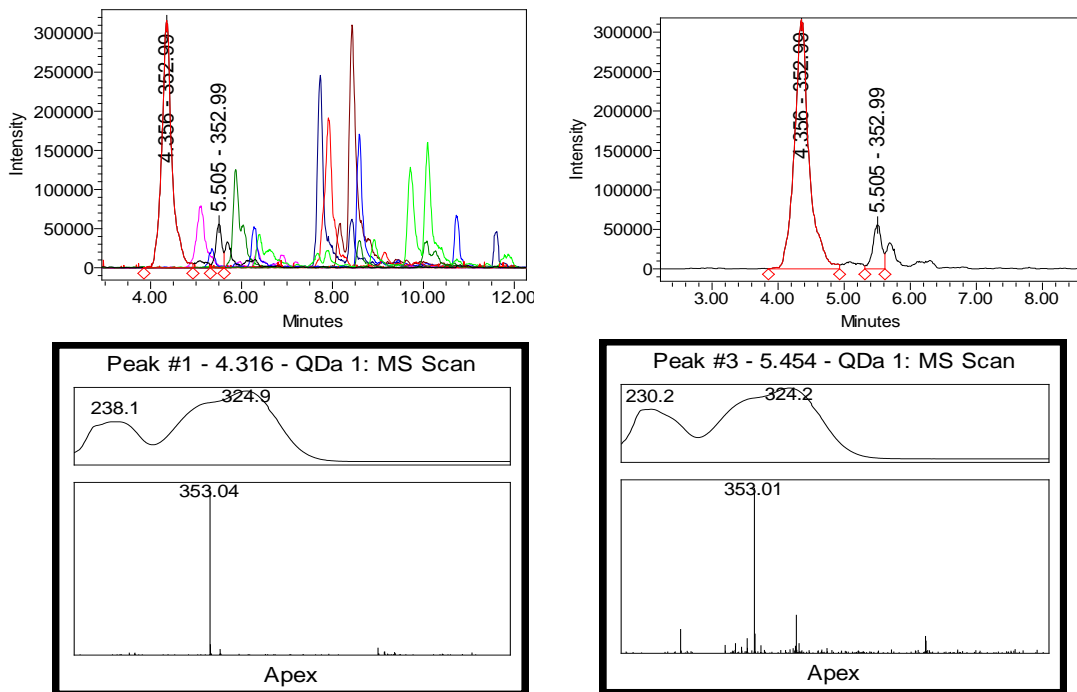
სურათი 33. ნივთიერება 32 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 33 [M-H] - m/z 337.06 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.101 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 310.6 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 33 შეესაბამება კუმაროილქუინის მჟავას (3-p-coumaroylquinic acid), MF: C₁₆H₁₈O₈ MW: 338.31გ/მოლი, IUPAC Name: (1R,3R,4S,5R)-1,3,4-trihydroxy-5-[(E)-3-(4-hydroxyphenyl)prop-2-enoyl]oxycyclohexane-1-carboxylic acid.



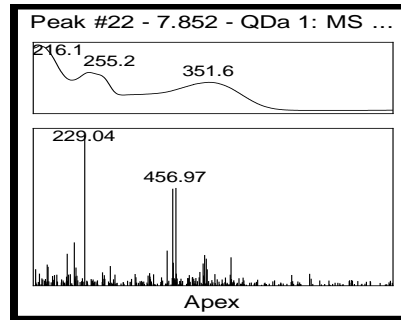
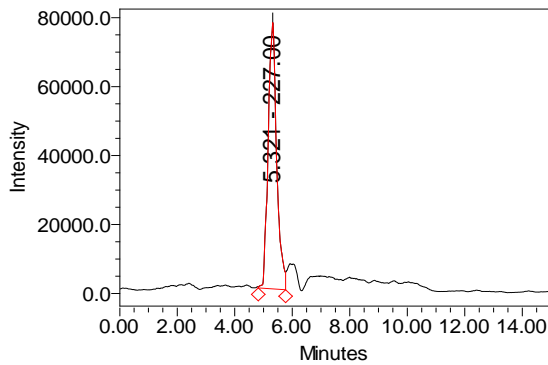
სურათი 34. ნივთიერება 33 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 34;35 [M-H] - m/z 353.04 და 353.01 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 4.316წთ და 5.454 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 324.9ნმ და 324.25ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 34 შეესაბამება ნეოქლოროგენის მჟავას (Neochlorogenic acid), MF: $C_{16}H_{18}O_9$ MW: 354.31გ/მოლი, IUPAC Name: (1R,3R,4S,5R)-3-[(E)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)prop-2-enoyl]oxy-1,4,5 trihydroxycyclohexane-1-carboxylic acid, ხოლო ნივთიერება 35 ქლოროგენის მჟავას (Chlorogenic Acid), MF: $C_{16}H_{18}O_9$ MW: 354.31გ/მოლი, IUPAC Name: (1S,3R,4R,5R)-3-[(E)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)prop-2-enoyl]oxy-1,4,5-trihydroxy cyclohexane-1-carboxylic acid.



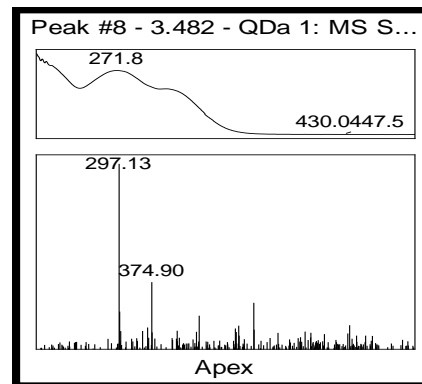
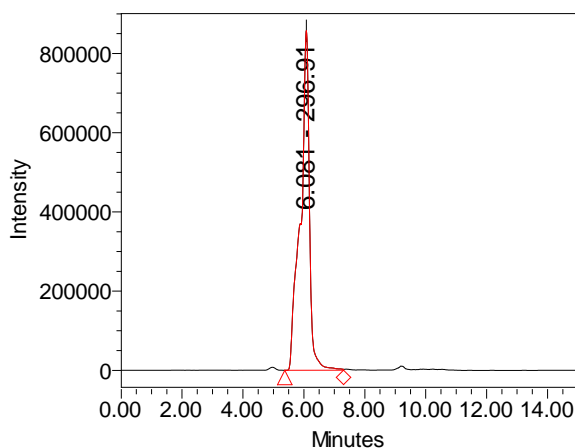
სურათი 35. ნივთიერება 34;35 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 36 [M-H] - m/z 227.00 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.321 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282.3 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 20 შეესაბამება რესვერატროლს (Resveratrol), MF: $C_{14}H_{12}O_3$ MW: 228.24გ/მოლი; IUPAC Name: 5-[(E)-2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]benzene-1,3-diol.



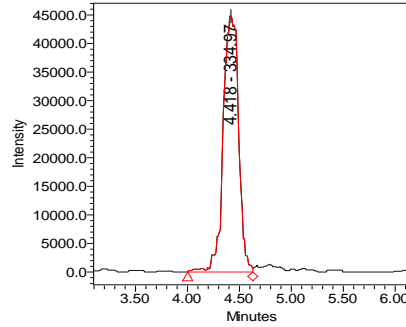
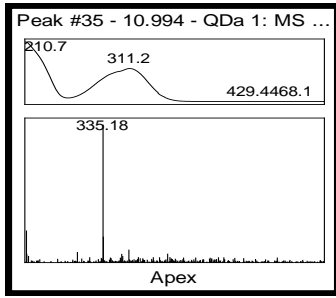
სურათი 36. ნივთიერება 36 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 37[M-H] - m/z 296.91 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 6.081 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 271.8 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 37 შესაბამება ჰექსოზილ ვაშლ მჟავას (Hexosyl-malic acid), MF: C₁₀H₁₈O₁₀ MW: 296 გ/მოლი;



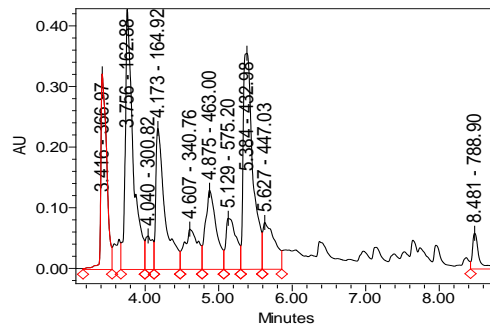
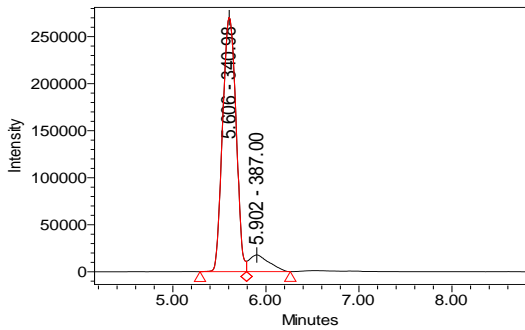
სურათი 37. ნივთიერება 37 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 38 [M-H] - m/z 335.18 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 10.994 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 311.2 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 38 შესაბამება კაფეოილ შიკიმის მჟავას იზომერი (isomeric caffeoylshikimic acids), MF: C₁₆H₁₆O₈ MW: 336.29გ/მოლი; IUPACName:(3R,4R,5R)-5-[(E)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)prop-2-enoyl]oxy-3,4-dihydroxycyclohexene-1-carboxylic acid



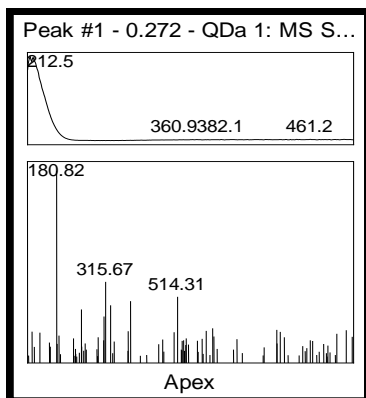
სურათი 38. ნივთიერება 38 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 39 [M-H] - m/z 340.98 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.606 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 282.3 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 39 შეესაბამება ყავის მჟავას ჰექსოზიდი (Caffeic acid hexoside), MF: $C_{15}H_{18}O_9$ MW: 342.30 გ/მოლი; IUPAC Name: 3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl] (*E*)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)prop-2-enoate .



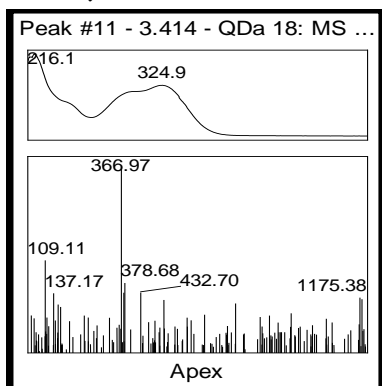
სურათი 39. ნივთიერება 39 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 40 [M-H] - m/z 180.82 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 9.040 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 212.5 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 40 შეესაბამება ჰექსოზე ალკოჰოლს (Hexose sugar alcohol), MF: $C_6H_{14}O_6$ MW: 180.02გ/მოლი;



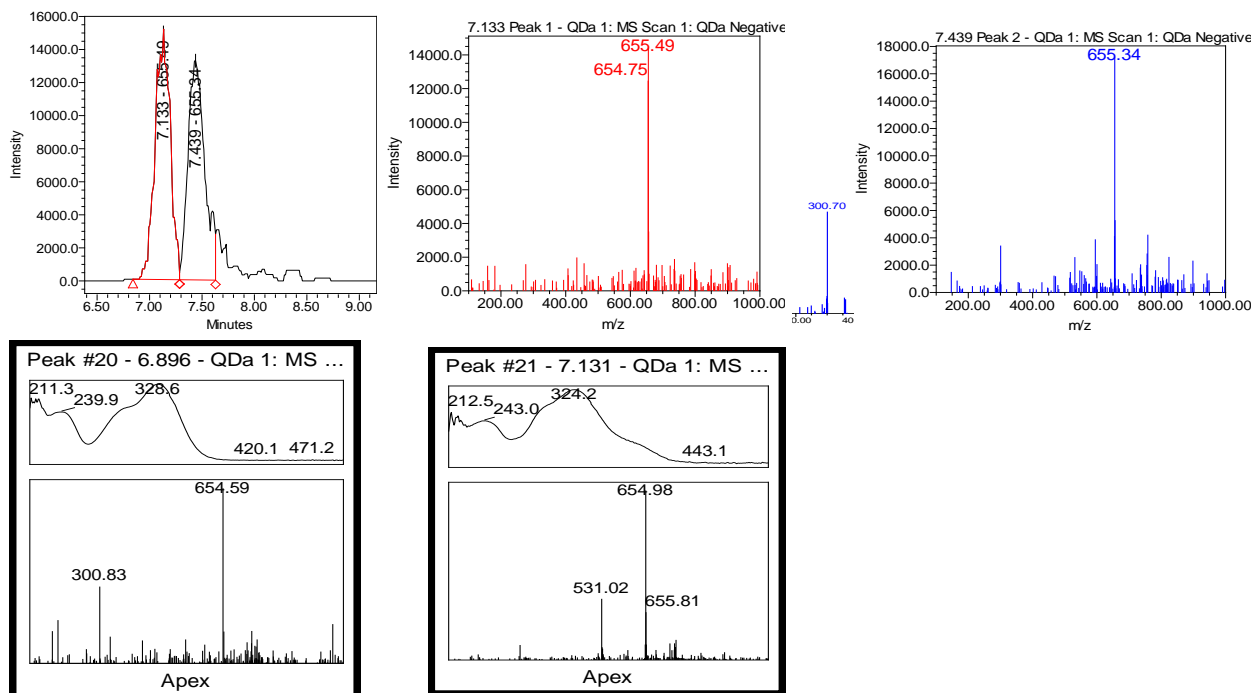
სურათი 40. ნივთიერება 40 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 41 [M-H] - m/z 366.97 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 3.414 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 324.9 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 41 შეესაბამება ფერუოილქვინის მჟავას (4-Feruloylquinic Acid), MF: C₁₇H₂₀O₉ MW: 368.3 გ/მოლი; (3R,5R)-1,3,5-trihydroxy-4-[(E)-3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)prop-2-enoyl]oxycyclohexane-1-carboxylic acid



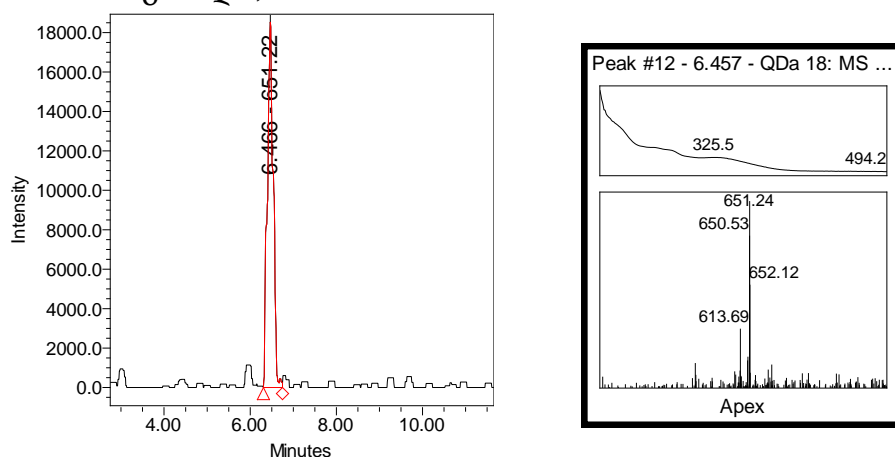
სურათი 41. ნივთიერება 41 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 42;43 [M-H] - m/z 655.49 და 655.34 (300.70) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 7.133 და 7.439 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 324.2 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 42 და 43 შეესაბამება კუმაროილ (ტეტრააცეტატილ) დიჰექსოზიდის იზომერს (Coumaroyl(tetraacetyl)-dihexoside isomer), MF: C₂₉H₃₆O₁₇ MW: 656 გ/მოლი.



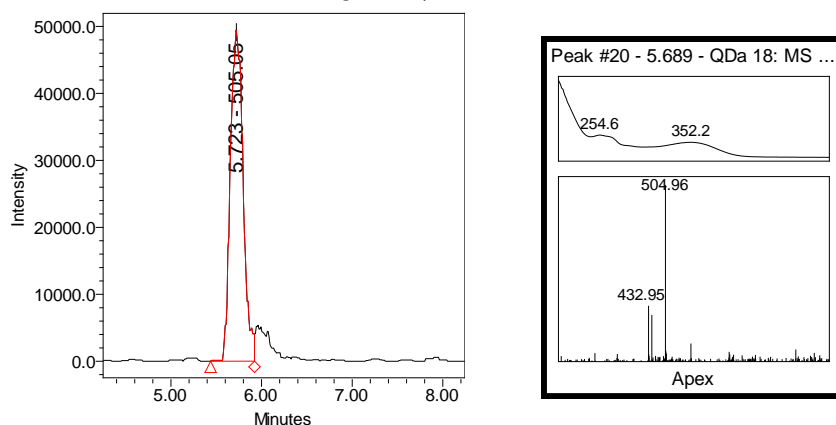
სურათი 42. ნივთიერება 42;43 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 44 [M-H] - m/z 651.22, ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 6.466 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 325,5 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 44 შეესაბამება კვერცეტინ-3-0-(აცეტილ) რუტინოზიდი (Quercetin-3-O-(acetyl) rutinoside), MF: [C₂₉H₃₄O₁₇](#) MW: 652 გ/მოლი;



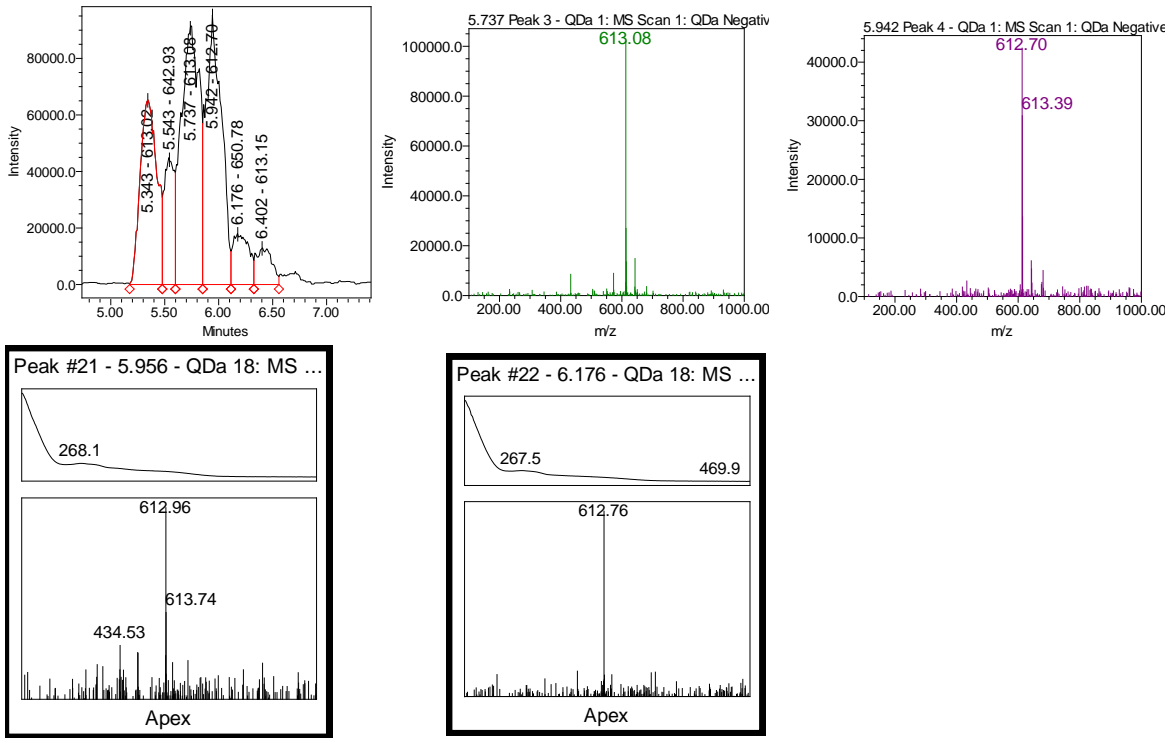
სურათი 44. ნივთიერება 44 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 45 [M-H] - m/z 505.1, ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.723 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 254.6 და 352.2 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 45 შეესაბამება კვერცეტინ-3-0-აცეტილ ჰექსოზიდი (Quercetin-3-O-(acetyl)-hexoside), MF: [C₂₃H₂₂O₁₃](#) MW: 506 გ/მოლი;



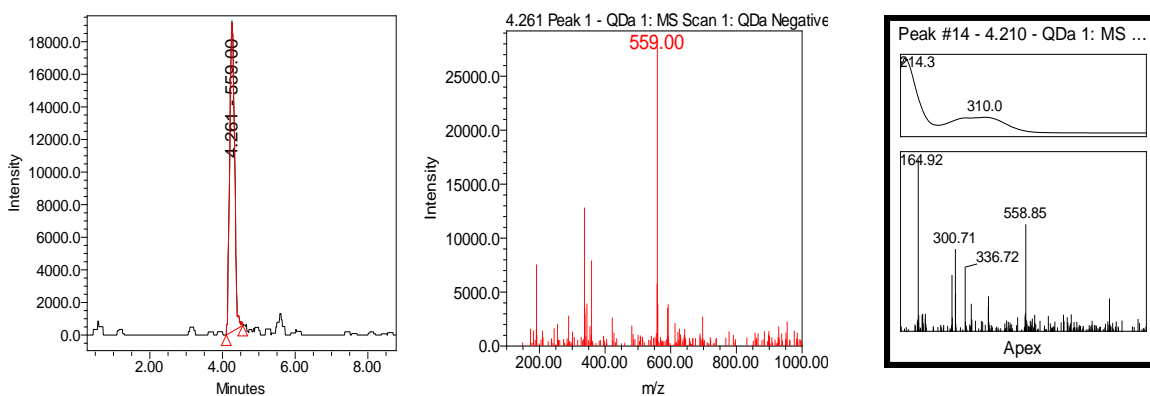
სურათი 45. ნივთიერება 45 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 46;47 [M-H] - m/z 613.08 და 613.39 (300.70) ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 5.737 და 5.942 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 268.1 და 267.5 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 46 და 47 შეესაბამება კუმაროილ (ტრიაცეტილ) დიჰექსოზიდის იზომერს (Coumaroyl(triacetyl)-dihexsosite isomer), MF: [C₂₇H₂₄O₁₆](#) MW: 614 გ/მოლი.



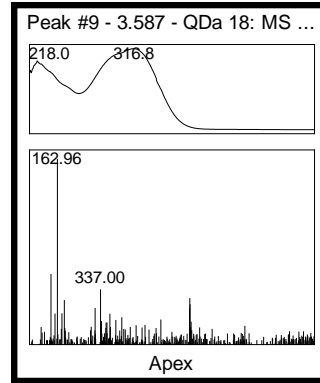
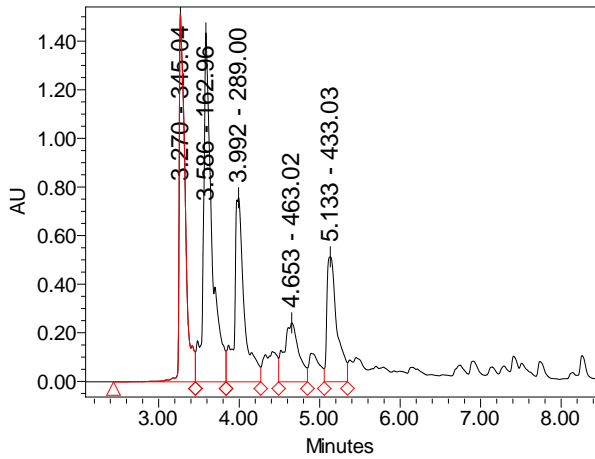
სურათი 46. ნივთიერება 46;47 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 48 [M-H] - m/z 559.00 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 4.261 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 310.0 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 48 შესაბამება ფერულილ-(აცეტილ) ჰექსოზიდი იზომერი (feruloil-(acetyl)-hexoside isomer), MF: $C_{24}H_{32}O_{15}$ MW: 560 გ/მოლი;



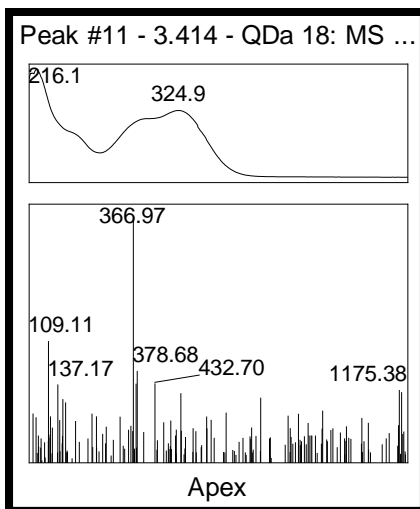
სურათი 47. ნივთიერება 48 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 49 [M-H] - m/z 162.96 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 3.587 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 316.8 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 49 შესაბამება კვერცეტინ-3-0-(აცეტილ)ჰექსოზიდი (Quercetin-(acetyl)-hexoside isomer), MF: $C_{23}H_{22}O_{13}$ MW: 506 გ/მოლი;



სურათი 48. ნივთიერება 49 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ნივთიერება 50 [M-H] - m/z 366.97 ფიქსირდება ქრომატოგრამაზე შეკავების დროით 3.414 წთ, შთანთქმის მაქსიმუმით 324.9 ნმ. მიღებული შედეგების შეჯერებით, ასევე ნაერთების მასების ბაზის (<https://metlin.scripps.edu>) შესაბამისად ნივთიერება 50 შესაბამემა ფერულოილ-ქუინის მჟავას (feruloil-quinic acid), MF: $C_{17}H_{20}O_9$ MW: 367.1 გ/მოლი;



სურათი 49. ნივთიერება 50 UPLC-PDA- MS ქრომატოგრამა M/Z (M-H).

ცხრილი 4. ტყემლის ფენოლოური ნაერთების UPLC-MS მახასიათებლები იონის LC-ESI MS negative და positive ანალიზისას

ნივთ- ბა	ნაერთი	RT (min)	მოლეკულის ფორმულა	m/z (M- H ⁺) ⁻	ფრაგმენ ტი	UV max. (nm)
19	კატეჟინი	5.348	C ₁₅ H ₁₄ O ₆ ,	288.97		281.7
20	ეპიკატეჟინი	6.278	C ₁₅ H ₁₄ O ₆ ,	288.85		281.7
21	კვერცეტინი	9.715	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	300.84		266.3
22	ნივთიერება 21	10.094	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	300.84		266.3
23	აპიგენინ 7-გლუკოზიდი	10.268	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	430.92		266.3
24	ბენზილ ჰექსოზე- ჰექსოზიდი	10.801	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	431.02		266.3
25	ლუტეოლინ-7- გლუკოზიდი	5.869	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	447.10		282.3
26	კვერცეტინ 3-რამნოზიდი	6.036	<u>C₂₁H₂₀O₁₁</u>	446.91		319.9
27	რუთინი (კვერცეტინ-3- რუტინოზიდი)	7.731	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	608.94		254.6; 351.6
28	კვერცეტინ-3-O- გლუკოზიდი	7.916	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	462.97		254.6; 352.2
29	კვერცეტინ-3-O არაბინოზიდი	5.225	C ₂₀ H ₁₈ O ₁₁	432.90		253.4
30	კვერცეტინ-3-O ქსილოზიდი	5.457	C ₂₀ H ₁₈ O ₁₁	433.01		352.2
31	პროციანიდინ B1	11.004	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	576.85		278
32	პროციანიდინ C1	10.732	C ₄₅ H ₃₈ O ₁₈	864.81		276.3
33	კუმაროილქუინის მჟავა	5.101	C ₁₆ H ₁₈ O ₈	337.06		310.6
34	ნეოქლოროგენის მჟავას	4.316	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	353.04		324.9
35	ქლოროგენის მჟავას	5.454	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	353.01		324.2
36	რესვერატროლი		C ₁₄ H ₁₂ O	227.24 (-) 229.09 (+)		282.3
37	ჰექსოსილ-ვამლმჟავა	6.081	C ₁₀ H ₁₈ O ₁₀	296.91		282.3
38	კოფეოილ შიმიწური მჟავები	4.634	C ₁₀ H ₁₈ O ₁₀	334.98		268.7
39	კოფეილის მჟავას ჰექსოზიდი	5.606	C ₁₅ H ₁₈ O ₉	340.98		311.2
40	ჰექსოზა შაქრის სპირტი	9.040	C ₆ H ₁₄ O ₆	180.82		212.5
41	ფერულოილქინის მჟავა	3.414	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	366.97		324.9
42	კუმაროილ(ტეტრააცეტილ)-დიჰექსოსიდის იზომერი	6.896	C ₂₉ H ₃₆ O ₁₇	655.16		324.2
43	კუმაროილ(ტეტრააცეტილ)-დიჰექსოსიდის იზომერი	7.439	C ₂₉ H ₃₆ O ₁₇	655.26	300.7	324.2
44	კვერცეტინ-3-O-(აცეტილ)- რუტინოზიდი	6.466	C ₂₉ H ₃₄ O ₁₇	651.22		325,5
45	კვერცეტინ-3-O-(აცეტილ)- ჰექსოზიდი	6.466	C ₂₃ H ₂₂ O ₁₃	505.05		352.2

46	კუმაროილ(ტრიაცეტილ)- დიჰექსოსიდის იზომერი	5.608	C ₂₇ H ₂₄ O ₁₆	613.01		268.1
47	კუმაროილ(ტრიაცეტილ)- დიჰექსოსიდის იზომერი	6.103	C ₂₇ H ₂₄ O ₁₆	613.04		267.5
48	ფერულოილ-(აცეტილ)- ჰექსოზა-ჰექსოზა იზომერი	4.261	C ₂₄ H ₃₂ O ₁₅	558.79		310.0
49	p-კუმარის მჟავა	3.587	C ₉ H ₈ O ₃	164.16		316.8
50	ფერულოილ- ქინაქინის მჟავა	3.414	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	366.97		324.9

4 ტყემლის ზოგიერთი ჯიშისა და სახეობის ნაყოფის წვენი კატიონების კვლევა კონდუქტომეტრული დეტექტორის გამოყენებით

ტყემლის ნაყოფის წვენი კატიონის კვლევა ჩატარდა ქრომატოგრაფიული მეთოდით, კონდუქტომეტრული დეტექტორით. იზოკრატიული ტუმბო (Isocratic HPLC pump -Waters 1515), დეტექტორი (Waters 432 -Conductivity), ქრომატოგრაფიული სვეტი IC-PakCationMD, ელუენტი 3 mM HNO₃/0.1 mM EDTA, ელუენტის გამტარებლობა 1250 ± 50 μS, საბაზო მგრძნობელობა 2000 μS, ინტეგრატორის მგრძნობელობა 0.01μS, სვეტის ტემპერატურა 35°C, პოლარობა-negative. ინჟექტირებამდე საანალიზო ნიმუშები ილექებოდა 1:1 თანაფარდობით 96%-იანი ეთილის სპირტით პექტინის დასალექად, ცენტრიფუგირების შემდეგ ნიმუშს 1:10 თანაფარდობით ემატებოდა დეიონიზირებული წყალი (განზავების ფაქტორი F=20) და იფილტრებოდა 0,45მკრ ზომის ფილტრში. მიღებული კომპონენტების იდენტიფიკაციისათვის და ნაერთების რაოდენობრივი შემცველობის დასადგენად (აგებული საკალიბრო მრუდები) გამოყენებული იქნა სტანდარტები: ლითიუმის ჰიდროქსიდის მონოჰიდრატი (Li⁺), ნატრიუმის ქლორიდი (Na⁺), ამონიუმის ქლორიდი (NH₄⁺), კალიუმის ქლორიდი (K⁺), მაგნიუმის ჰიდრატი (Mg²⁺), კალციუმის ნიტრატი ტეტრაჰიდრატი(Ca²⁺), სტრონციუმის ნიტრატი ტეტრაჰიდრატი (Sr²⁺), ბარიუმის ქლორიდი დიჰიდრატი(Ba²⁺) (FisherScientific), EDTA (Serva).

ლითიუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 3.55e+005 X - 7.26e+003$

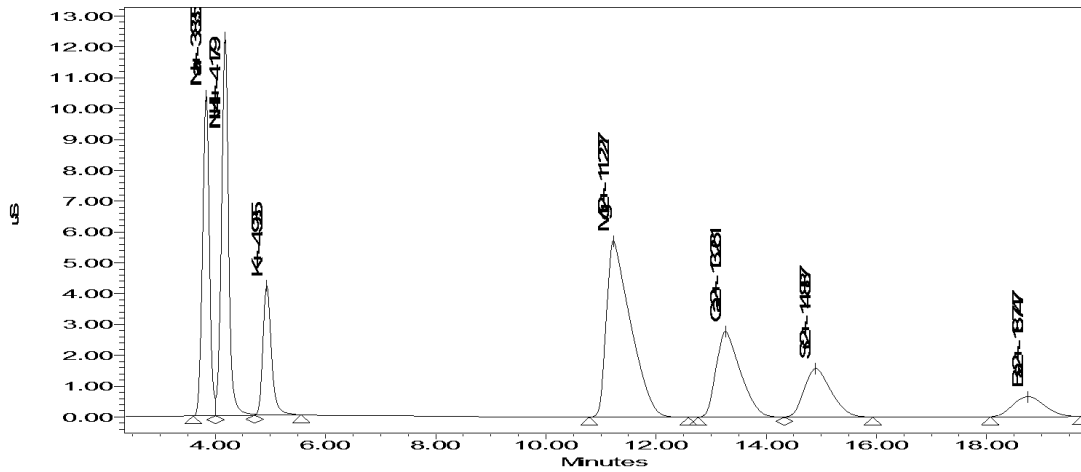
ნატრიუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 1.44e+005 X + 9.50e+004$

ამონიუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 1.65e+005 X + 1.21e+005$

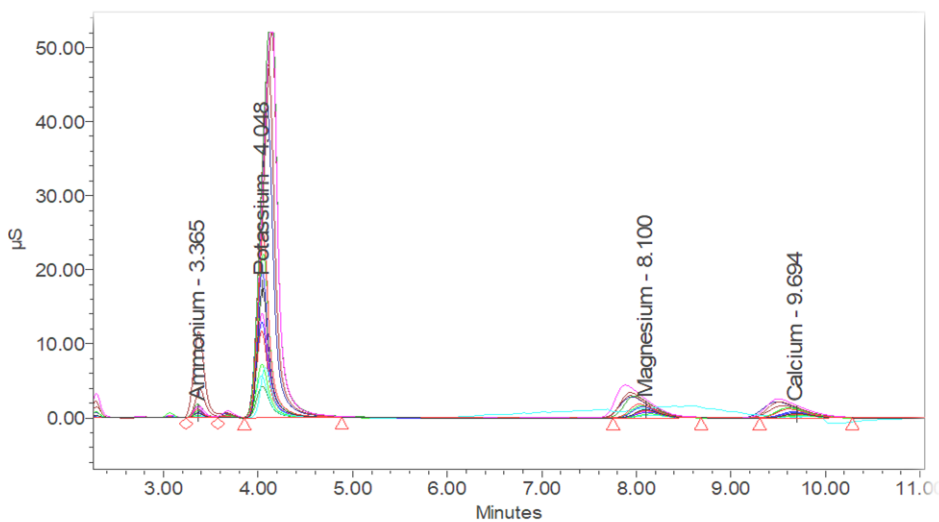
კალიუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 7.79e+004 X + 6.01e+004$

მაგნიუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 2.97e+005 X + 2.76e+005$

კალციუმის საკალიბრო მრუდის ფორმულა $Y = 1.28e+005 X + 2.28e+005$



ნახ.50. მინერალურ ნივთიერებათა სტანდარტული ქრომატოგრამა და სპექტრის მახასიათებლები



სურათი 50 . ტყემლის წვენი კატიონების დამახასიათებელი ქრომატოგრამა

ტყემლის წვენი კატიონების ქრომატოგრაფიული დახასიათება ცხრილი: 9

ნიმუშის დასახელება	ამონიუმი	კალიუმი	მაგნიუმი	კალციუმი
გაზაფხულის მერცხლი	0,684±0.020	107,703±4.092	3,492±0.132	8,256±0.280
ახალციხურა	0,949±0.030	32,12±1.284	0,67±0.227	1,422±0.051
მირაბელა		13,046±0.391		0,108±0.004
აჭარული ვარდისფერი	1,209±0.041	155,11±4.963	3,433±0.123	4,305±0.172
წითელი ველური ხულო	2,859±0.102	136,537±4.6422	4,308±0.163	7,886±0.252
აჟანის უნგრულა	0,221±0.008	36,939±1.329	0,874±0.034	1,313±0.044

ქრომატოგრამებზე სულ მცირე 4 ძირითადი კატიონი ფიქსირდება: ამონიუმი, კალიუმი, მაგნიუმი და კალციუმი. ტყემლის ნიმუშებში დომინანტი კალიუმის კატიონებია.

თავი 5. ტყემლის კურკის ლიპიდური ბუნების ნაერთები

ტყემლის კურკის კარბონმჟავების შედგენლობის კვლევა - განხორციელდა აირ-სითხური ქრომატოგრაფის (TRACE™ 1310 Gas Chromatograph - Thermo Scientific) საშუალებით. ქრომატოგრაფირება მიმდინარეობდა ქრომატოგრაფიულ კაპილარულ სვეტზე - SGE BPX5 Capillary GC Column 30 მ სიგრძის, 0,25 მმ დიამეტრის და 0,25 მკმ უძრავი ფაზის ნაწილაკების ზომით. უძრავ ფაზას წარმოადგენდა 5% Phenyl Polysilphenylene-siloxane.

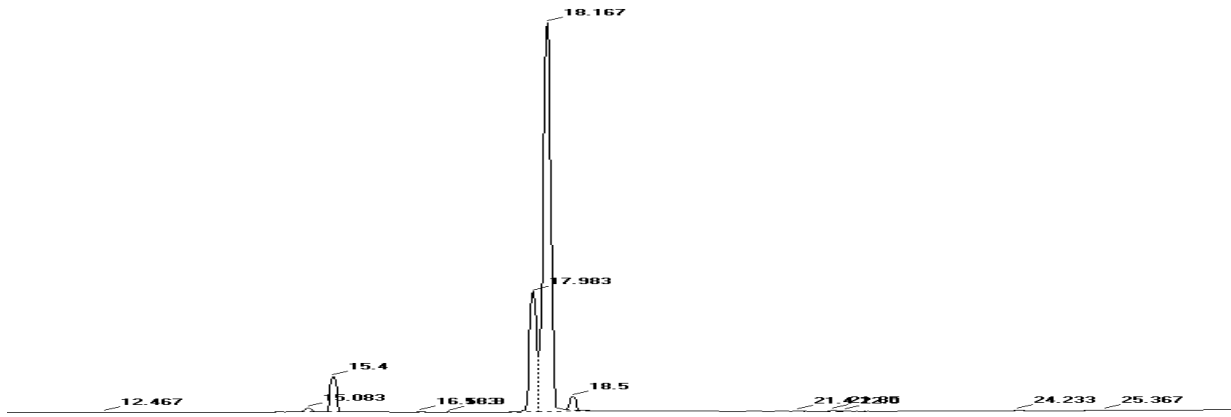
ტყემლის კურკისაგან ცხიმის მისაღებად აღებული იქნა 50 გრამი ჰაერზე გამშრალი წინასწარ დატეხილი კურკები, რომელიც დაქუცმაცდა Bosh-ის ფირმის საფქვავეში და მოთავსდა მუდმივ წონამდე მიყვანილ ფილტრის ქაღალდში. პაკეტი ნიმუშთან ერთად გამოშრა 70 °C (1 სთ) და საექსტრაქციოდ მოთავსებული იქნა სოქსლეტის აპარატში 48 საათის განმავლობაში. ექსტრაქცია მიმდინარეობდა ჰექსანით ცხიმოვანი და პიგმენტური ნაერთების სრულ მოცილებამდე. მიღებული მასა გაშრა საშრობ კარადაში 70°C -ზე მუდმივ წონამდე. დადგინდა, რომ ლიპიდები შეადგენს მასის 40-45%-ს.

ცხიმის აირ-სითხური ქრომატოგრაფირებისათვის აუცილებელია მათი ეთერიფიკაცია, რისთვისაც ისინი მექანიკური მინარევებისაგან გასაწმენდად წინასწარ გაიფილტრა. შემდგომ დაცენტრიფუგირდა და სუოერნანტანტს დაემატა 0.5 მლ 2 ნორმალური KOH-ის 96% სპირტ ხსნარი (შესაძლებელია ეთანოლის ან მეთანოლის გამოყენება). შემდეგ, დაემატა 10 მლ ჰექსანი (საერთო მოცულობა 11,5 მლ). მორევა განხორციელდა სრულ გახსნამდე (მინიმუმ 30 წამის განმავლობაში) და დაცენტრიფუგირდა 10 წუთის განმავლობაში 1000 ბრ/წთ-ზე.

ნიმუშის ზედა ფრაქციიდან 1 მკლ საკვლევი ნიმუშის ინჟექტირება ხორციელდებოდა SGE Analytical Science ფირმის 1.0 მკლ მიკროშპრიცის მეშვეობით. ქრომატოგრაფირებისას მოძრავ ფაზას წარმოადგენს ჰელიუმი, რომლის მოძრაობის სიჩქარე შეადგენს 0,700 მლ/წუთში. ინჟექტორის ტემპერატურული რეჟიმი 250°C-ია, ხოლო, სვეტში შესაყვანი ნიმუშის ჰელიუმის ნაკადში დაყოფა ხორციელდებოდა 1/100 თანაფარდობით.

ქრომატოგრაფირება განხორციელდა ტემპერატურულ გრადიენტით სამ ეტაპად. კერძოდ, ქრომატოგრაფირება იწყება 140°C -ზე, რომელიც მიმდინარეობდა 4 წუთის განმავლობაში. მეორე ეტაპზე ტემპერატურა 20°C/წუთში სიჩქარით იზრდებოდა 220°C-მდე და გრძელდებოდა 16 წუთი. მესამე ეტაპზე ტემპერატურა 7°C/წუთში სიჩქარით იზრდებოდა 300°C-მდე და გრძელდებოდა აღნიშნულ ტემპერატურაზე 7 წუთის განმავლობაში.

ქრომატოგრაფირების სრული დრო შეადგენდა 42,43 წუთს. კარბონმჟავების რაოდენობრივი შემცველობა ისაზღვრება პიკის ფართობის მიხედვით პროცენტებში 0,01%-ის სიზუსტით.



სურ.52. ლიპიდების მეთილ ესტერების აირ-სითხური ქრომატოგრამა

ქრომატოგრაფირების მეშვეობით მიღებული კომპონენტების იდენტიფიკაცია განხორციელდა ცნობილი შედგენილობის მქონე ნიმუშის, ასევე ზოგიერთი სტანდარტული ნაერთის გამოყენებით და ლიტერატურულ მონაცემებთან შედარებით. დადგინდა ტყემლის ზეთში კარბონმჟავების სპეციფიკური შედგენილობა. ანალიზის შედეგები მოყვანილია ქრომატოგრამაზე (სურ.52).

ქრომატოგრაფიულმა კვლევამ დაგინდა, რომ ტყემლის კურკიდან მიღებული ზეთი შეიცავს ცამეტამდე ცხიმმჟავას, კერძოდ C 16 -პალმიტინის მჟავა, C 17-ჰეპტადეკან მჟავა, C 18- ლინოლენის მჟავა (C18:2n6c) ცის-ლინოლის მჟავა (ომეგა-6), ოლეინის მჟავა (C18:1n9c), ელაიდური მჟავა (C18:1n9t), სტეარინის მჟავა (C18:0) (ცხ. №10).

ცხრილი №10. კარბონმჟავათა კომპონენტური შემადგენლობა

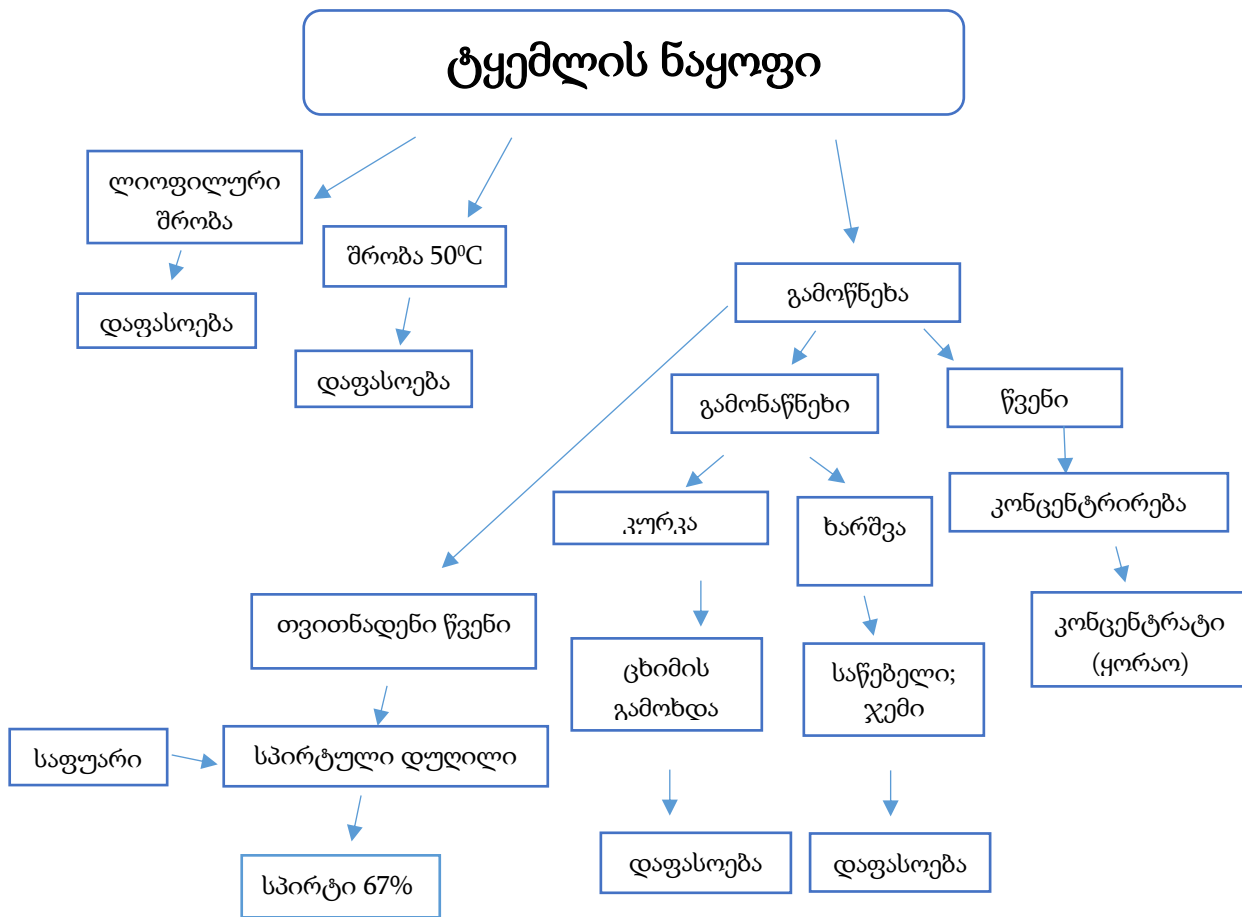
პიკი	კომპონენტის დასახელება	შეკავების დრო (წთ)	ფართობი %
1	Tetradecanoate acid methyl ester (C14:0)	12,467	0.022±0.001
2	Palmitoleic acid methyl ester (C16:1)	15,083	0.563±0.015
3	Palmitic acid methyl ester (C16:0)	15,400	5.199±0.135
4	Heptadecanoic acid methyl ester (C17:1)	16,533	0.107±0.003
5	Heptadecanoic acid methyl ester (C17:0)	16,900	0.049±0.001
6	Linoleic acid methyl ester (C18:2n6c)	17,983	20.246±0.526
7	Oleic acid methyl ester (C18:1n9c)	18,167	71.487±1.859
8	Stearic acid methyl ester (C18:0)	18,500	1.967±0.051
9	Eicosapentaenoic acid methyl ester (C20:5n3)	21,400	0.059±.002
10	Eicosenoic acid methyl ester (C20:1)	21,850	0.177±0.005
11	Erucic acid methyl ester (C22:1)	24,233	0.080±0.002
12	Behenic acid methyl ester (C22:0)	25,367	0.025±0.001
13	Nervonic acid methyl ester (C24:1)	30,900	0.019±0.001

დასკვნის სახით შეიძლება ითქვას, რომ ტყემლის კურკიდან მიღებული ზეთის შემადგენლობაში C18 კარბონმჟავები დომინანტია, მათი შემცველობა ცხიმის საერთო შემცველობის 92,685%-ს შეადგენს. კერძოდ დომინანტ კარბონმჟავას წარმოადგენენ ოლეინის მჟავა (C18:1n9c) 61,488%-ს შემცველობით.

ტყემლის ნაყოფის გადამუშავების პროდუქტებში ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების ცვლილებების ქრომატოგრაფიული შესწავლა

ტყემლის ნაყოფი მაღალუჭეხადი ხილია თავისი ნაზი სტრუქტურის გამო. ეს კი მოითხოვს მოსავლის აღების შემდგომ შენახვასა და გადამუშავებას ტემპერატურული პირობების კონტროლით. რაც ხელს შეუწყოს ტყემლის გადამუშავების შემდგომ მის მოხმარებას მთელი წლის განმავლობაში. ტყემალი ბიოლოგიურად აქტიური ნაერთების მაღალი შემცველობით ხასიათდება და შესაბამისად, მაღალი ანტიოქსიდანტური აქტივობით გამოირჩევა. გადამუშავება და პროდუქციის შენახვა მოითხოვს ოპტიმალური პირობების დაცვას, რითაც მაქსიმალურად იქნება შენარჩუნებული ნედლეულის ხარისხი.

ტყემლის ნაყოფში ინდივიდუალური ნაერთების იდენტიფიკაციის შემდგომ საინტერესო იყო თუ როგორ ხდება მათი გადანაწილება ნაყოფის სხვადასხვა ნაწილში - კანი, რბილობი, წვენი, ასევე რა ცვლილებები მიმდინარეობს ნაყოფის გადამუშავების დროს.



სქემა 2. ტყემლის ნაყოფის გადამუშავება

ტყემლის ნაყოფის გადამუშავება. საანალიზოდ მოწოდებული ნიმუშის საერთო მასა შეადგენდა 20 კგ, სადაც ნაყოფი - 19,7 კგ (საერთო მასის 98.5%), ფოთოლი და ყუნწი - 0,3 კგ (საერთო მასის 1.5%) წარმოადგენდა.

ტყემლის ნაყოფის ბიოლოგიურ აქტივობას განსაზღვრავს მაღალი ანტიოქსიდანტური ანტოციანები, ფენოლკარბონმჟავები და ფლავონები. ტყემლის ნაყოფში მათი გადანაწილება არათანაბარია. ფენოლური ნაერთები მაღალი კონცენტრაციითაა ნაყოფის კანში (14752.15მგ/კგ), საიდანაც ძირითადი ნაწილი კატექინები (11889.02მგ/კგ) და ანტოციანებია (პროანტოციანებია). ნაყოფის ფენოლური ნაერთების წყალში ხსნადი ფორმების სიჭარბის გამო წვენიში ფენოლური ნაერთების 70%-მდე გადადის, მსგავსი სურათია სხვა ნაერთებთან მიმართებაშიც.

ტყემლის ნაყოფისა და მისგან მიღებული პროდუქტების ბიოაქტიური ნაერთები მნიშვნელოვან ცვლილებებს განიცდის ნაყოფის თერმული დამუშავების დროს. მურაბის მომზადებისას მათი შემცველობა 10-ჯერ მცირდება, ჯემში კი 5-ჯერ და მეტჯერ მცირდება. ნაწილობრივ ამის მიზეზი დამატკბობელის (შაქარი; გლუკოზა და სხვა) გამოყენებაა, მაგრამ ძირითადი ზეგავლენა სწორედ მაღალი ტემპერატურაა

ცხრილი 11. ტყემლის ნაყოფისა და მისგან მიღებული პროდუქტების ბიოაქტიური ნაერთები

ნიმუში	ფენოლები შშ.მ. გადაანგ. მგ/100გ	ფლავონოი- დები მგ/100გ	ანტოციანებ ი მგ/100გ	ლეიკოანტ ოციანები მგ/100გ	კატექინები მგ/100გ	AA 0.1 mM DPPH 50% ინჰიბირება
მთლიანი ნაყოფი	10804.99±324.14	384.05±11.52	656.20±26.24	210.37±7.99	8930.80±267.92	9.56±0.28
რბილობი	10679.03±341.72	412.93±14.03	483.07±18.35	173.11±6.23	7902.57±252.88	8.22±0.263
კანი	14752.15±501.57	267.18±9.61	1662.96±59.86	608.61±20.69	11889.02±428.00	4.71±0.160
ანაწნები	7766.38±295.12	307.63±11.07	784.10±26.65	235.27±7.05	6770.34±257.27	9.50±0.361
ჯემი	2108.82±73.8087	43.25±1.64	117.48±3.75	42.02±1.34	1502.63±60.1052	11.99±0.35
მურაბა	1410.25±50.769	24.40±0.73	18.01±0.54	13.20±0.46	473.49±17.04	18.68±0.67
ყორაო	16335.62±620.75	490.45±15.69	2326.87±81.44	435.46±16.54	12242.90±428.50	2.12±0.08
წვენი	7313.08±277.89	264.829.53	481.18±17.32	162.96±4.88	6215.60±223.76	30.56±0.97
საწებელი	11392.49±387.34	233.25±8.397	726.06±23.23	239.46±8.62	8762.35±297.91	4.56±0.173
ტყლაპი	5496.02±175.87	182.01±6.55	371.62±11.14	126.82±4.56	4896.89±176.28	6.90±0.276

წვენის მიღება. ტყემლის წვენი მიიღება ცივი დაწნებით ან ბლანშირების შემდეგ. კარგად დამწიფებულ ნაყოფს ცილდება კურკა (კურკა გამცლელი დანადგარი) და შემდგომ დაქუცმაცებული მასა დაწვნიხეთ. მიღებული მასა გავფილტრეთ. მეორე ვარიანტი ნაყოფის ბლანშირებაა მწვავე ორთქლით ან მცირე რაოდენობით წყალთან გაცხელებით. ცხელი მასის დაყოვნებით და წვენის განშრევეების შემდეგ მისი მოცილებით. წვენის გამოსავალი ცივი დაწნების დროს შეადგენდა 60 – 62,5 %, მიღებულ წვენიში წყალში ხსნადი ნაერთები - Brix იყო 7,9 – 8,1 % ((ექსტრაქტული ნაერთები 7,3 – 7,35 %), ტიტრული მჟავიანობა 5,21 – 5,24 %. ანტოციანების შემცველობა 140 - 145 მგ/ლ. ბლანშირებით მიღებული წვენის გამოსავალი შეადგენდა 60 – 62,5 %, მიღებულ წვენიში წყალში ხსნადი

ნაერთები - Brix იყო 7,9 – 8,1 % ((ექსტრაქტული ნაერთები 7,3 – 7,35 %), ტიტრული მჟავიანობა 5,21 – 5,24 %. ანტოციანების შემცველობა 140 - 145 მგ/ლ. წვენის გარკვეული ნაწილი რბილობია (ცივი დაწნეხისას 30 %, ზღანშირებისას 33 %). ანარჩენის სახით რჩება კურკა (15-17%) და კანი რბილობით (3-5%-მდე).

წვენის კონცენტრატის წარმოება - წვენი დაკონცენტრირებულ იქნა ვაკუუმის პირობებში (40 – 45 °C ტემპერატურაზე). კონცენტრატის წარმოება წვენის მოცულობას ამცირებს 7 (Brix 55%) - 9 ჯერ (Brix 60%), რაც მნიშვნელოვნად ამცირებს შესანახი ნედლეულის მოცულობას. წვენის კონცენტრატში მაქსიმალურად არის შენარჩუნებული ანტოციანები შემცველობა-1305 – 1685 მგ/კგ.

ტყემლის წვენში წყალში ხსნადი ნაერთები ე.წ. Brix იყო 10-11%-მდე, ანტოციანების შემცველობა 191,67 მგ/ლ. წვენი გამოყენებულ იქნა, როგორც ტყემლის „ღვინო“ მასალა, შესაბამისად დამატებულ იქნა კულტურული საფუარი და აქტივატორი, მიღებულ „ღვინოში“, ანტოციანების შემცველობა 188,02 მგ/ლ. ალკოჰოლური დუდილის შედეგად დაგროვდა 5,5,-6 %-მდე ეთილის სპირტი. დადუღებული მასა გაფილტვრის შემდეგ გადავდენეთ (ვაკუუმის პირობებში). გადანადენში- ტყემლის არაყში ეთილის სპირტის შემცველობა 55%-მდეა (მეორადი გადადენით). ჩავატარეთ სხვადასხვა მეთოდით მიღებული ტყემლის არაყის კვლევა. ვაკუუმის პირობებში მიღებული კონცენტრატი ინარჩუნებს სასიამოვნო საგემოვნო თვისებებს და გამოვიყენეთ ტყემლის საწებელის მომზადებისას რბილობის შემავსებლად.

ტყემლის ნაყოფის დაწნეხის შემდე დარჩენილი **ანაწნეხი** წარმოადგენს საერთო მასის დაახლოებით 20%. მისი ძირითადი ნაწილი ცხიმ შემცველი (39 % ცხიმი) კურკაა.

ტყემლის არაყის აირ-სითხური ქრომატოგრაფიული კვლევა.

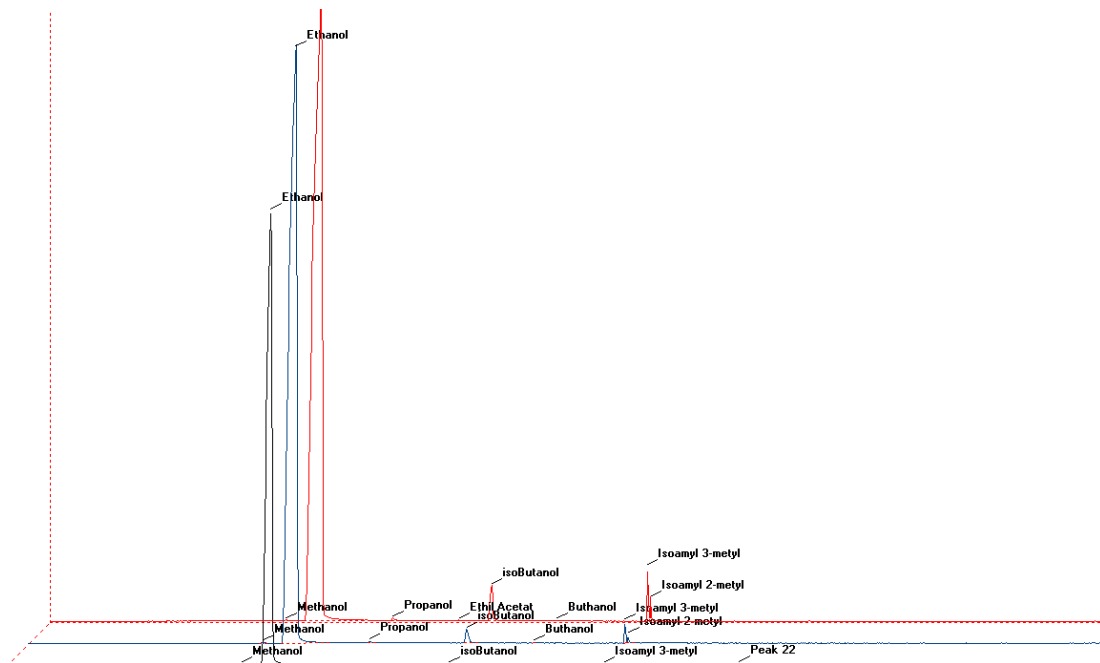
ტყემლის წვენის და სხვა პროდუქტების სპირტული დუდილი წარიმართა სპონტანური საფუარის გამოყენებით (დაახლოებით 15-20 დღე). გადადენით მიღებულ ტყემლის დისტილატს კვლევა ჩატარდა აირ-სითხური ქრომატოგრაფის (TRACETM 1310 Gas Chromatograph – Thermo Scientific) საშუალებით. ქრომატოგრაფირება მიმდინარეობდა ქრომატოგრაფიულ კაპილარულ სვეტზე - SGE BPX5 Capillary GC Column 30 მ სიგრძის, 0,25 მმ დიამეტრის და 0,25 მკმ უძრავი ფაზის ნაწილაკების ზომით. უძრავ ფაზას წარმოადგენდა **5% Phenyl Polysilphenylene-siloxane**.

ქრომატოგრაფირებისას მოძრავ ფაზას წარმოადგენს ჰელიუმი, რომლის სიჩქარის გრადიენტია შეადგენს: 1) 5 წუთი 0,500 მლ/წუთში, 2) 2 წუთი 0,700 მლ/წუთში, 3) 2 წუთი 1,000 მლ/წუთში, 4) 20,5 წუთი 2,000 მლ/წუთში. საკვლევი ნიმუშის ინჟექტირება ხორციელდებოდა SGE Analytical Science ფირმის 10 მკლ მიკრომპრიცის მეშვეობით.

ინჟექტორის ტემპერატურული რეჟიმი წარმოადგენდა 250°C-ს, ხოლო, სვეტში შესაყვანი ნიმუშის ჰელიუმის ნაკადში დაყოფა ხორციელდებოდა 1/300 თანაფარდობით.

ქრომატოგრაფირება ხორციელდებოდა ტემპერატურულ გრადიენტში ორ ეტაპად. კერძოდ ქრომატოგრაფირება დავიწყეთ 28°C -ზე, რომელიც მიმდინარეობდა 8 წუთის განმავლობაში. მეორე ეტაპზე 20 (°C/წუთში) სიჩქარით იზრდებოდა 280°C-მდე და ქრომატოგრაფირება გრძელდებოდა 7 წუთი. ქრომატოგრაფირების სრული დრო შეადგენდა 27,60 წუთს.

ქრომატოგრაფირების მეშვეობით დაყოფილი სპირტების დეტექტირება ხდებოდა ალურ-იონიზაციურ დეტექტორზე. დეტექტორის ტემპერატურა შეადგენდა 300°C -ს, წყალბადის მიეწოდებოდა 35 მლ/წთ., ჰაერი 300 მლ/წთ., აირების განდევნა ხორციელდებოდა ჰელიუმით 30 მლ/წთ. დეტექტორის სამუშაო რეჟიმი დიაგრამის სახით მოცემულია სურათ 53-ზე.



სურათი № 53 ტყემლის არაყი GC ქრომატოგრამა

ა-პექტინ მოცილებული; ბ-ტყემლის წვენი; გ- ტყემლის წვენის და რბილობის ნარევის

ტყემლის არაყი მიღებული იყო რამდენიმე მეთოდის გამოყენებით, რათა დაგვედგინა მეთანოლის შემცველობაზე მადულარა მასაში პექტინის შემცველობის კავშირი. საინტერესოა, რომ წვენიდან პექტინის მოცილებას არ გამოიწვია მიღებულ არაყში მეთანოლის შემცველობის შემცირება, პირიქით ის რამდენადმე მეტია (0.085%) ვიდრე ტყემლის წვენის (0.053 %) და ტყემლის წვენისა და რბილობისაგან მიღებულ არაყში (0.053). ამ მიმართულებით კვლევები გასაგრძელებელია. მაგრამ სხვა კომპონენტების შემცველობა მნიშვნელოვნად მცირდება პროპანოლი არ დეტექტირდება, მაშინ როდესაც

სხვა ნიმუშებში 0.1 %-მდეა. მნიშვნელოვანი სხვაობაა ბუთანოლის შემცველობაშიც 0.05% და 0.9 და 1.9 % შესაბამისად წვენიანსა და რბილობიანში. ასეთივე სურათია იზოამილის წარმოებულების შემთხვევაშიც. პექტინ მოცილებული მასიდან მიღებულ არაყში ის პრაქტიკულად არაა, მაშინ როდესაც სხვა ნიმუშებში ჯამურად თითქმის 2 %-ზე მეტია.

ცხრილი 12. ტყემლის არაყის ძირითადი კომპონენტები

№	კომპონენტის დასახელება	ტყემლის არაყი პექტინ მოცილებული	ტყემლის არაყი	წვენის	ტყემლის წვენის და რბილობის არაყი
1	მეთანოლი	0.085±0.002	0.053±0.001		0.053±0.002
2	ეთანოლი	99.764±3.192	99.075±3.368		96.2012.886
3	პროპანოლი	0.	0.107±0.004		0.094±0.003
4	ეთილ აცეტატი	0	0		0.027±0.001
5	იზო ბუთანოლი	0.054±0.001	0.914±0.031		1.978±0.069
6	ბუთანოლი	0	0.018±0.0005		0.033±0.001
7	იზოამილ 3-მეთილი	0.060±0.002	0.603±0.021		1.117±0.040
8	იზოამილ 2-მეთილი	0	0.231±0.008		0.495±0.018
9	Peak 22	0.037±0.001	0		0

ფენოლური ნაერთების ცვლილებები დამუშავების დროს

ტყემლის ნაყოფში ფენოლური ნაერთების ცალკეული წარმომადგენლის ცვლილება დამუშავების მეთოდებიდან გამომდინარე სხვადასხვა გზით ხდება. ანთოციანებზე თერმული მოქმედების შედეგად მათი შემცველობა მნიშვნელოვნად მცირდება რაოდენობრივად. მათი შემცველობა ჯემში თითქმის 30-ჯერ მცირდება. ასევე 10-ჯერ შემცირდა საწებელში და 4-ჯერ კონცენტრატში (ყორაო) (ცხ. 13).

ტყემლის პროდუქტების ანტოციანები ცხრილი №13

დასახელება	Cy-gal	Cy-rut	Peo-rut	სულ მგ/გ
მთლიანი ნაყოფი	70.300±2.109	57.7±1.846	21.128±0.8451	151.001±4.530
რბილობი	7.551±0.241	5.289±0.190	2.742±0.082	17.581±0.597
წვენი	9.268±0.296	5.541±0.210	2.466±0.093	17.983±0.539
კანი	60.309±1.929	31.025±1.241	135.158±4.325	393.669±4.738
ტყლაპი ტრადიციული	1.743±0.055	1.968±0.074	1.684±0.058	5.395±0.178
ტყლაპი ლიოფილურად გამშრალი	9.934±0.349	3.706±0.101	26.873±0.811	47.094±1.695
ყორაო ვაკუუმით	7.398±0.251	16.892±0.641	4.806±0.144	43.796±1.532
ყორაო ტრადიციული	3.903±0.156	10.246±0.327	3.384±0.121	41.538±1.453
მურაბა	0.818±0.024	3.365±0.107		6.049±0.205
ტყემლის საწებელი A	1.574±0.059	5.058±0.202	2.59±0.093	15.682±0.548
ტყემლის საწებელი C	10.470±0.353	13.195±0.501	2.903±0.087	30.049±0.967
ტყემლის საწებელი ლიოფილურად გამშრალი A	9.606±0.344	14.77±0.485	69.771±2.132	138.819±4.355

ტყემლის პროდუქტების ფენოლკარბონ მჟავები, კატექინები და პროანტოციანები
ცხრილი №14

დასახელება	ნეოქლოროგენის მჟავა	ქლოროგენის მჟავა	(+)-კატექინი	პროციანიდინი A2	სულ მგ/გ
მთლიანი ნაყოფი	0.47±0.016	0.46±0.017	0.2±0.006	0.052±0.001	1.182±0.02
რბილობი	0.13±0.004	0.24±0.009	0.03±0.0009	0.010±0.0035	0.41±0.01
წვენი	0.59±0.023	0.79±0.025	0.49±0.018	0.011±0.004	1.881±0.03
კანი	0.21±0.007	0.07±0.002	0.09±0.003	0.01±0.004	0.384±0.011
ტყლაპი ტრადიციული	0.09±0.003	0.14±0.005	0.07±0.002	0.003±0.0001	0.303±0.009
ტყლაპი ლიოფილურად გამშრალი	0.61±0.023	1.35±0.047	0.3±0.01	0.017±0.0006	2.277±0.033
ყორაო ვაკუუმით	0.09±0.002	0.17±0.005	0.08±0.002	0.003±0.0001	0.26±0.009
ყორაო ტრადიციული	0.09±0.003	0.16±0.006	0.07±0.002	0.003±0.0001	0.25±0.008
მურაბა	0.149±0.005	0.415±0.013	0.02±0.0007	0.003±0.0001	0.567±0.015
ტყემლის საწებელი A	0.04±0.001	0.11±0.003	0.02±0.0007	0.003±0.0001	0.15±0.004
ტყემლის საწებელი C	1.32±0.050	1.02±0.040	0.2±0.007	0.003±0.0001	2.413±0.07
ტყემლის საწებელი ლიოფილურად გამშრალიA	1,37±0.041	1.69±0.050	0.07±0.002	0.003±0.0001	3.15±0.085

ტყემლის პროდუქტების კვერცეტინის წარმოებულები ცხრილი №15

დასახელება	რუთინი	კვერცეტინ-3-O- გლუკოზიდი	კვერცეტინ-3-O- პენტოზიდი	სულ მგ/გ
მთლიანი ნაყოფი	1.27±0.038	0.75±0.03	0.91±0.029	2.93±0.087
რბილობი	0.31±0.009	0.56±0.016	0.8±0.027	1.67±0.053
წვენი	0.46±0.015	1.29±0.041	1.28±0.046	3.03±0.103
კანი	0.09±0.003	0.31±0.0105	0.16±0.006	0.56±0.020
ტყლაპი ტრადიციული	0.13±0.004	0.21±0.007	0.27±0.009	0.61±0.023
ტყლაპი ლიოფილურად გამშრალი	0.96±0.038	2.75±0.1045	0.345±0.013	4.055±0.141
ყორაო ვაკუუმით	0.023±0.0006	0.152±0.006	0.029±0.0009	0.204±0.007
ყორაო ტრადიციული	0.018±0.0005	0.117±0.003	1.47±0.049	1.605±0.060
მურაბა	0.32±0.0108	0.7±0.0245	0.47±0.016	1.49±0.059
ტყემლის საწებელი A	1.13±0.0406	0.78±0.029	0.4±0.015	2.31±0.08
ტყემლის საწებელი C	0.04±0.001	0.04±0.001	0.1±0.0004	0.18±0.005
ტყემლის საწებელი ლიოფილურად გამშრალიA	0.32±0.012	0.31±0.009	0.01±0.0004	0.64±0.024

ტყემლის ნაყოფში ნეოქლოროგენის და ქლოროგენის მჟავები დომინანტი ნაერთებია (მთლიან ნაყოფში 0.47 და 0.46 მგ/გ შესაბამისად). თუმცა ტემპერატური ზემოქმედება აქაც უარყოფითად მოქმედებს. მურაბაში მათი შემცველობა ნახევარზე ნაკლებია, საწებელში კი სანელებლების და მასის კონცენტრირების ხარჯზე მატულობს. ტრადიციულ ტყლაპში მნიშვნელოვნად კლებულობს, მაშინ როდესაც ლიოფილურად გამშრალში თითქმის 10-ჯერ მეტია (ცხრილი 14).

ტყემლის ნაყოფში მნიშვნელოვანი რაოდენობითაა კვერცეტინის წარმოებული ფლავონოიდური გლიკოზიდები (რუთინი, კვერცეტინ-3-0-გლუკოზიდი და პენტოზიდი. ტემპერატურის ზემოქმედება აქაც უარყოფით ზეგავლენას ახდენს, ამცირებს მათ შემცველობას (ცხრილი 15).

დასკვნები:

1. შესწავლილია დასავლეთ საქართველოში გავრცელებული ტყემლის (*Prunus cerasifera Ehrh*) ზოგიერთი ველური ფორმის (5 ფორმა) და კულტურული ჯიშის (5ჯიში) ნაყოფის ტექნიკური მახასიათებლები და წვენის ზოგიერთი ფიზიკო-ქიმიური მაჩვენებლები, რის საფუძველზეც დადგენილ იქნა, რომ ნაყოფი პასუხობს სტანდარტის მოთხოვნებს;

შესწავლილია ტყემლის ნაყოფის ზოგიერთი ველური ფორმის და კულტურული ჯიშის ქიმიური შედგენილობა HPLC პრეპარატული კოლექტორის და UPLC PDA-MS დეტექტორის გამოყენებით. ინდივიდუალურად გამოყოფილი და იდენტიფიცირებული იქნა 4 კარბონმჟავა (ვაშლ მჟავა, ქუინის მჟავა, ლიმონმჟავა და გალაქტურონის მჟავა) და 3 ნახშირწყალი (გლუკოზა, ფრუქტოზა და საქაროზა);

2. ტყემლის ნაყოფის ზოგიერთი ველური ფორმის და კულტურული ჯიშის ყველა შესწავლილ შემთხვევაში, რაოდენობრივად, ვაშლ მჟავა ჭარბობს სხვა კარბონმჟავების შემცველობას და მათი საერთო რაოდენობის 55–60%-მდეა. ქუინის მჟავა გროვდება მჟავათა მთელი მასის 20-25%-მდე, ხოლო ლიმონის მჟავა უმნიშვნელო რაოდენობითაა (საერთო მასის 5%-მდე). ამ ნაერთების უდიდესი რაოდენობა გადადის წვენში (85-90%);

3. ტყემლის ნაყოფის ზოგიერთი ველური ფორმის და კულტურული ჯიშის შესწავლილის შემთხვევაში წითელ ნაყოფა მწვანე ფოთლიან ჯიშებში და ფორმებში გლუკოზა დომინანტია და ნახშირწყლების შემცველობის 50%-ზე მეტია, ხოლო წითელ ფოთლიან ფორმებში დომინანტი საქაროზაა (60%-მდე). ტყემლის ნაყოფის წვენში შაქარ/მჟავა ინდექსი 4-ზე ნაკლებია;

4. წითელნაყოფა ტყემლის ნაყოფის ზოგიერთი ველური ფორმის და კულტურული ჯიშის რბილობისგან, წვენისა და გამონაწნებისგან იდენტიფიცირებულია 5 ანტოციანური აგლიკონი (ციანიდინი; პეონიდინი; პეტუნიდინი; მალვიდინი;

პელარგონიდინი) და ანტოციანიდინი (ციანიდინ-3-0-გალაქტოზიდი; ციანიდინ-3-0-გლუკოზიდი; ციანიდინ-3-0-რუთინოზიდი; პეონიდინ-3-0-რუთინოზიდი; მალვიდინ-3-0-პარა-კუმაროილ გლუკოზიდი). დომინანტ ნაერთს ყველა შემთხვევაში წარმოადგენდა ციანიდინის წარმოებულები (ციანიდინ-3-0-რუთინოზიდი) და იგი შეადგენს შესაბამისად რბილობში, წვესა და გამონაწნეხში 25.6მგ/კგ–9.6მგ/კგ–12.48მგ/კგ-ს.

5. დადგენილია ტყემლის ზოგიერთი ველური ფორმის და კულტურული ჯიშის ნაყოფში კატეჩინისა და ეპიკატეჩინის შემცველობა, ასევე პროციანიდინები B1 და C1-ის არსებობა. ამ ნაერთების ჯამური შემცველობა 8930.80 მგ/ 100გ-შია (მ.მ.გ.)

6. ფლავონოიდური გლიკოზიდებიდან იდენტიფიცირებულია აპიგენინ 7-გლუკოზიდი; ლუტეოლინ-7-გლუკოზიდი; რუთინი (კვერცეტინ-3-რუთინოზიდი); კვერცეტინ-3-0-გლუკოზიდი; კვერცეტინ-3-0 არაბინოზიდი და აგლიკონი კვერცეტინი; მათი ჯამური შემცველობა 384.05 მგ/100 გ-მდეა;

7. ტყემლის ნაყოფი მდიდარია ფენოლკარბომჟავებით; იდენტიფიცირებულია კუმაროილქუინის მჟავა; ნეოქლოროგენის მჟავა; ქლოროგენის მჟავა;

8. ტყემლის ნაყოფში იდენტიფიცირებულია სტილბენი რესვერატროლი;

9. HPLC მეთოდით კონდუქტომეტრული დეტექტორის გამოყენებით დადგენილია, რომ ტყემლის წვენების კათიონებიდან დომინანტი კალიუმის იონებია (2160.5±49.69ppm). ტყემლის წვენებში ასევე ფიქსირდება კალციუმის 536-1000.02 ppm, და მაგნიუმის 536.73±12.34 ppm.

10. შემუშავდა ტყემლის ნაყოფის გადამუშავების კომპლექსური ტექნოლოგია, რომელიც იძლევა საშუალებას, ტყემლის წვენი გამოყენებული იქნას „ტყემლია არაყის „ მისაღებად, ხოლო კონცენტრატი შემდგომში გამოყენებული იქნას შემავსებლად;

11. დადგენილია, რომ ტყემლის კურკა შეიცავს 40-45 %-მდე ცხიმს, რომელიც ძირითადად უჯერი ლინოლისა და ოლეინის მჟავებითაა წარმოდგენილი.

12. ტყემლის არაყის შემუშავებული ტექნოლოგია საშუალებას იძლევა შემცირდეს მეთანოლის და მაღალი რიგის სპირტების შემცველობა;