

O'zbekiston

Kompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал
Композиционные материалы

15. Omar A.Y., Abdel-Fattah W.I., Ibrahim M.A. On the structural analysis and electronic properties of chitosan/hydroxyapatite interaction // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 2009. V.6. – P.1663-1669.
16. Ibrahim M.A., Abdel-Fattah W.I., Omar A.Y. A novel model for chitosan/hydroxyapatite interaction. Quantum matter. 2013. V.2. – P.1-4.
17. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // The Journal of Chemical Physic. 1993. V.98. – P.5648-5652.
18. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., et al. 2010. Gaussian. Inc. Wallingford CT.
19. Boys S.F., Bernardi F. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors. Molecular Physics. 1970. V.19. I.4. – P.553-566.
20. Vokhidova N.R., Ergashev K.H., Rashidova S.S. Hydroxyapatite-chitosan Bombyxmori: synthesis and physicochemical properties // Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials. 2020. V.30. I.9. – P. 3357-3368.
21. Vokhidova N.R., Ergashev K.H., Rashidova S.Sh. Synthesis and application of chitosan hydroxyapatite: a review // Progress on Chemistry and Application of Chitin and its Derivatives. 2022. V.27. – P.5-34.

Kalit so'zlar: xitozan, gidroksiapatit, DFT, nanokompozit, modellastirish

Gidroksiapatit(GA) tuzilishi va xitozan(XZ) pentomeri orasidagi o'zaro ta'sirini o'rganishning nazariy natijalari keltirildi. Zichlik funksionali nazariyasi metodi orqali XZ va GA zanjirlari orasidagi muvozanat masofa, energiya adsorbsiyasi va geometriyasi hisoblandi. Olingan natijalardan ma'lum bo'ldiki, XZ sirtida ($E_i = -1,44$ eV) ionlashish va zaryad ko'chirish mavjud bo'lmaganda GAning xemosorbsiyaga moyilligi bo'lishini termodinamik parametrlarni hisoblashlar ko'rsatadi. Joriy ish natijalari biomedicina sohasida ushbu nanokompozit materiallarining potensial qo'llanishini o'rganishda foydali bo'ladi.

Ключевые слова: хитозан, гидроксипатит, DFT, нанокмпозит, моделирование.

Представлены теоретические результаты исследования взаимодействия между пентамером хитозана (ХЗ) и структурой гидроксипатита (ГА). Методом теории функционала плотности были рассчитаны геометрия, энергия адсорбции и равновесного расстояния между цепочкой ХЗ и ГА. Полученные результаты свидетельствуют о том, что ГА склонен к хемосорбции на поверхность ХЗ ($E_i = -1,44$ эВ) при отсутствии переноса заряда и ионизации, что показали рассчитанные термодинамические параметры. Результаты текущей работы будут полезны при изучении потенциальных применений этих нанокмпозитных материалов в биомедицинской области.

Key words: Chitosan, hydroxyapatite, DFT, nanocomposite, modeling.

The theoretical results the interaction between the chitosan pentamer (CS) and the hydroxyapatite (HA) structure are presented. The density functional theory method was used to calculate the geometry, adsorption energy and equilibrium distance between the chain of CS and HA. The obtained results indicate that HA is prone to chemisorption on the CS surface ($E_i = -1.44$ eV) in the absence of charge transfer and ionization, which was shown by the calculated thermodynamic parameters. The results of the current work will be useful in exploring the potential applications of these nanocomposite materials in the biomedical field.

Бурханова Нилуфар Жалоллидиновна
Нругалиев Ильнар Накипович

- PhD докторант, Институт химии и физики полимеров АН РУз;
- д.ф.-м.н., заведующий лабораторией, Институт химии и физики полимеров АН РУз;

Рашидова Сайёра Шарафовна

- д.х.н., профессор, академик, директор, Институт химии и физики полимеров АН РУз

УГЛЕРОД НАНОМОДИФИКАТОРЛАРИ БИЛАН МОДИФИКАЦИЯЛАНГАН ПОЛИПРОПИЛЕН АСОСИДАГИ КОМПОЗИТЛАРНИНГ ЮҚОРИ ВА ПАСТ ҲАРОРАТЛАР ТАЪСИРИГА БАРҚАРОРЛИГИНИ ДЕРИВАТОГРАФИК ТАҲЛИЛИ

T.Z. Xaydarov, A.A. Rahmankulov, M.U. Karimov, A.T. Djalilov

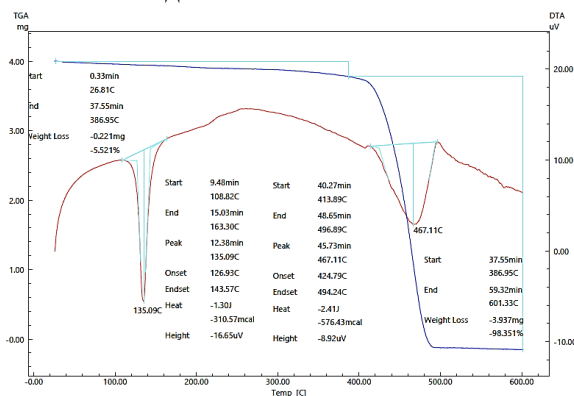
Кириш. Маълумки, полимерни ишлатиш мумкин бўлган ҳароратлар соҳаси мўртлик ҳарорати ва эриш ҳарорати ўртасидаги

интервал билан чегараланган. Шунинг учун мос модификаторни танлаш орқали полимерларнинг иссиқ ва совуққа чидамлилигини ошириш

технологик жихатдан муҳим вазифа саналади.

ДТГ - бу парчаланиш тезлиги саналувчи, дМ/дТ нисбати билан ифодаланган масса ўзгаришидан ҳосила. У нанокўшимчали композитларнинг термооксидланиш деструкциясини кўрсатади. 430°C диапазонида жойлашган асосий чўкқидан олдин 300°C да марказли “елка” мавжуд. УНТ асосидаги композит учун асосий чўкқи жойлашуви УНТдагига нисбатан юқориқроқ ҳарорат соҳасига силжиган, шундан келиб чиқиб, масса ўзгаришининг асосий жараёнлари 1)намуна учун юқориқроқ ҳароратларда ўтади. Шу тариқа, нанокўшимчали полиэтиленнинг иссиққа чидамлилиги асос қилиб олинганидан юқориқроқ.

1-расмдан кўришиб турибдики, ДТГ да биринчи 135.09 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Бу намунанинг суёқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 467.11 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши борётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Умумий масса йўқотилиши эса 98.351 % ни ташкил этади.

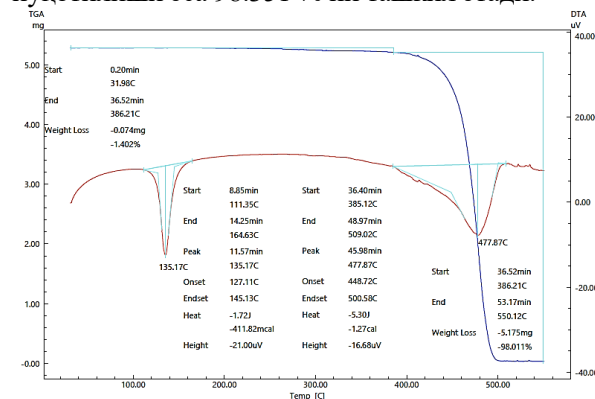


1-расм. 0.1 % микдорда УНТ билан модификацияланган И-1561маркали полиэтиленнинг дифференциалтермик таҳлили

1-расмдан кўришиб турибдики, ДТГ да биринчи 135.17 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Бу намунанинг суёқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 477.87 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши бораётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Умумий масса йўқотилиши эса 98.011 % ни ташкил этади.

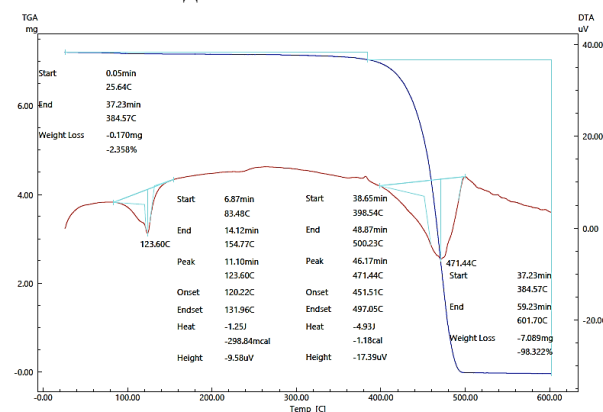
2-расмдан кўришиб турибдики, ДТГ да биринчи 135.17 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Суёқланишнинг бошланиш нуктаси 127.11 °C да бўлиб, 145.13 °C да суёқланиш жараёни тўлиқ тугайди. Бу намунанинг суёқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 467.11 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши бораётгани намунани деструкция

жараёнидан далолат беради. Умумий масса йўқотилиши эса 98.351 % ни ташкил этади.



2-расм. 1 % микдорда УНТ билан модификацияланган И-1561 маркали полиэтиленнинг дифференциалтермик таҳлили

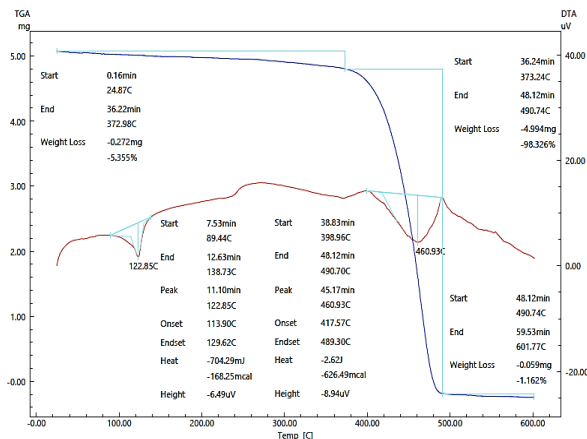
2-расмдан кўришиб турибдики, ДТГ да биринчи 135.17 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Бу намунанинг суёқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 477.87 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши бораётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Умумий масса йўқотилиши эса 98.011 % ни ташкил этади.



3-расм. 0.1 % микдорда УНТ билан модификацияланган Ф-0120 маркали полиэтиленнинг дифференциалтермик таҳлили

3-расмдан кўришиб турибдики, ДТГ да биринчи 123.6 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Бу намунанинг суёқланишнинг бошланиш нуктаси 120.22 °C да бўлиб, 131.96 °C да суёқланиш жараёни тўлиқ тугайди. Бу суёқланиш жараёнида 1.25 Джоул иссиқлик ютилиш. Олинган полимер материални гравиметрик таҳлил қиладиган бўлсак. Полимер материалда масса камайиши, жараён бошлангандан 5 дақиқа ўтиб кузатилади, бу вақтда ҳарорат 25.64 °C ни ташкил қилган. Ушбу жараён 37.23 дақиқа давом этган бўлиб, умумий масса камайиш 0.17 мг яни 2.358 фоизни ташкил қилган. Кейинги 471.44 °C да юзага келаётган эндоэффект масса

йўқотилиши борётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Парчаланиш бошланиш нуктаси 451.51 °C да бўлиб, 497.05 °C да парчаланиш жараёни тўлиқ тугайди. Умумий масса йўқотилиши эса 98.322 % ни ташкил этади. Бу парчаланиш жараёнида 1.25 Джоул иссиқлик ютилган.



4-расм. 0.05 % микрорда УНТ билан модификацияланган Ф-0120 маркали полиэтиленнинг дифференциалтермик таҳлили

4-расмдан кўриниб турибдики, ДТТ да биринчи 122.85 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Суюқланишнинг бошланиш нуктаси 113.9 °C да бўлиб, 129.32 °C да суюқланиш жараёни тўлиқ тугайди. Бу суюқланиш жараёнида 704.29 м Джоул иссиқлик ютилган. Бу намунанинг суюқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 460.93 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши борётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Умумий масса йўқотилиши эса 98.326 % ни ташкил этади.

4-расмдан кўриниб турибдики, ДТТ да биринчи 122.69 °C да юзага келаётган эндоэффект масса камайиши билан бормаяпти. Бу намунанинг суюқланаётганлигидан далолат беради. Кейинги 458.8 °C да юзага келаётган эндоэффект масса йўқотилиши борётгани намунани деструкция жараёнидан далолат беради. Парчаланиш бошланиш нуктаси 451.51 °C да бўлиб, 497.05 °C да парчаланиш жараёни тўлиқ тугайди. Умумий масса йўқотилиши эса 95.950 % ни ташкил этади.

1-жадвал

Турли углерод модификаторлари билан модификацияланган ўзгартирилган полипропилен учун дифференциал сканерлаш калориметрияси маълумотлари

Намуна номи	Т суюқланиш бошланиш, °C	Т суюқланиш чўққиси, °C	ΔH _{эриш} , Дж/г	Т эгр. чўққиси, °C	Кристаллик даражаси, %
Асос ПП	155,0	171,0	90,57	112	75
ППўзг+ 0,01 мас.% УНТЗ	156,5	172,33	92,4	114,8	79,7
ППўзг+ 0,05 мас.% УНТЗ	156,4	172,4	104,3	117,2	89,4
ППўзг+ 0,1 мас.% УНТЗ	159	178,6	106,7	117,8	91,5
ППўзг+ 1 мас.% УНТЗ	155,6	176,5	91,7	117,4	79

Олинган термограммалар асосида композит намуналари бошланғич эриш ҳароратлари, максимал эндодермик эриш эффектига эришишга мос келувчи ҳароратлар, эриш энтальпияси ва композитларнинг кристаллик даражалари олинди (1-жадвал). Намуналарнинг кристалланиш ҳароратлари алоҳида аниқланди.

Хулоса. Углерод наномодификаторлари билан модификацияланган полипропилен асосидаги полимер композитларнинг физик-

механик хоссаларига 0,1мас.% углерод модификаторлари ва бор-йўғи 0,01мас.% УНТ зарраларидан фойдаланилган ҳолда эришилади. Ўхшаш натижаларни юқори даражада ўзига хос мустаҳкамлик ва қаттиқликка эга углерод наномодификаторларининг тирқишлар ҳосил бўлиши ва ривожланишига тўсқинлик қилиши билан изоҳлаш мумкин, бу узилиш ва эгишда мустаҳкамликнинг ошиши ва айниқса зарбий ёпишқоқликнинг сезиларли даражада ортишида намоён бўлади.

АДАБИЁТЛАР:

- Киреев В. В. Высокомолекулярные соединения. – 2015.
- Santonja-Blasco L., Zhang X., Alamo R. G. Crystallization of precision ethylene copolymers //Polymer Crystallization I. – 2015. – С. 133-182.
- Ниезкулов Ш.Ш., Каримов М.У, Джалилов А.Т, Бобилова Ч.Х. Анализ физико-механических и электрических свойств полимерных и углеродных наполнителей с использованием технологии сжижения //Универсум технические науки.2021. №7(88). С. 75-79
- Niyozkulov Sh.Sh, Karimov M.U, Jalilov A.T.Properties of Nanocomposites Based On High Density Polyethylene//International Journal of Advanced Research in Science,Enjineering and Technology .2021. №8. P. 17601-17604.
- Гусева М.А., Структура и физико-механические свойства нанокмпозитов на основе неполярного полимера и слоевого силиката: Автореф... дис.канд. физ.-мат. наук. Москва: ИНХС РАН, 2004. 21 с.

1. Химия и физикохимия композиционных материалов и нанокompозитов

М.Н. Негматова, К.С. Негматова. Исследование механизма образования металлокомплексов на основе поливалентных металлов для крашения хлопчатобумажных тканей.....	3
Д.К. Абдуллаева, А.Ш. Гиясов, Р.Ш. Абдуматжитов, Э.А.Эгамбердиев. Избирательная экстракция йодидного комплекса серебра (I) и фотометрическое определение его с 1-(2-пиридилазо)-2-нафтолом. (ПАН).....	6
С.С. Негматов, К.С. Негматова, М.Э. Икрамова, Ш.Н. Жалилов, С.И. Назаров, Э.Д. Ниёзов, Г.К. Ширинов, Н.И. Назаров, Б.Б. Бахромов, Н.Ф. Расулова. Исследование модификации мочевиноформальдегидной смолы с реакционно-способными соединениями.....	9
M.R. Yuldasheva, D.B. Rimbayev, G.U. Begimova. Analitik reagent, bo'yoq, antiseptik xususiyatlariga ega aromatik diazo birikmalar sintezi.....	12
Н.Ж. Бурханова, И.Н. Нургалиев, С.Ш. Рашидова. Изучение взаимодействия при получении нанокompозита хитозан/гидроксипатит.....	16
T.Z. Xaydarov, A.A. Rahmankulov, M.U. Karimov, A.T. Djalilov. Углерод наномодификаторлари билан модификацияланган полипропилен асосидаги композитларнинг юкори ва паст хароратлар таъсирига баркарорлигини дериватографик тахлили.....	19
Х.Б. Рахматов, О.Х. Абдуллаев, А.Ю. Дустов, Д.Х. Рахматов. Исследование влияния различных факторов на процесс синтеза высокомолекулярных углеводов из синтез-газа.....	22
Х.Х. Тураев, А.И. Холбоева, Ф.Н. Нуркулов, Д.Т. Якубова, Ф.С. Нарманова. Таркибида азот, олтингугурт бўлган органик олигомерлар синтез қилиш технологиясини ишлаб чиқиш.....	25
Х.Б. Рахматов, О.Х. Абдуллаев, А.Ю. Дустов, Д.Х. Рахматов. Исследование кинетики реакции высокомолекулярных углеводов с синтез-газом.....	29
M.M. Jurayev, S.Y. Xushvaqtoev, N.M. Qutlimuratov. Polivinilxlorid plastikat asosida olingan yangi ionitning fizik-kimyoviy xossalari.....	32
А.Ю. Дустов, О.Х. Абдуллаев, М.А. Абдурахимов. Некоторые предпосылки подбора катализаторов синтеза пиррола и его гомологов в паровой фазе.....	34
С.М. Туробжонов, Б. Кеделбаев, Г. Рахмонбердиев, Р. Чориев, Б. Мухитдинов, Х. Кадилов. Исследования свойств гетерогенных катализаторов синтеза ацетонитрила.....	37
Н.Ш. Зулярова, О.С. Бобокулова, М.Э. Кенжаев, Р.Р. Тожиев, И.И. Усманов. Кинетика разложения минерализованной массы азотной кислотой.....	40
С.Р. Отаджонов, А.Б. Абдикамалова, Ш.З. Саидова, Н.Т. Каттаев, Х.И. Акбаров, В.Г. Колядин. Изотермическая сорбция растворителей различной природы производными поливинилимидазола.....	44
Ж. Саидов. N-морфолин-3-хлоризопрпилакрилат билан стирол ва метилакрилат асосидаги сополимер присадкаларнинг дизел ёқилгисига таъсири.....	47
С.А. Бердиев. Эпихлоргидрин ва спиртлар асосидаги кислород сақлаган октан сонини оширувчи қўшимчаларни олиш ва физик –кимёвий хоссаларни тадқиқ этиш.....	50
С.У. Соатов, А.Т. Джалилов, Э.С. Соттикулов, М.Г. Ишмухамедова. Таркибида кушбоғ тутган пластификатор синтези ва унинг физик-кимёвий тахлиллари.....	54

2. Физико-механика и трибология композиционных материалов

К.С. Негматова, Ш. Аликобулов, М.А. Ахмаджонов, С.С. Негматов, Ё.С. Ражабов. Исследование износостойкости и физико-механических свойств физически модифицированных ультразвуком разработанных композиционных полимерных материалов и разработка способа повышения долговечности покрытий из них, работающих в условиях контактного взаимодействия с абразивно-влажной бетонной среде.....	57
S.T. Parmonov, F.Y. Hakimov. Yeyilishga bardoshli volfram karbid-kobalt asosli qattiq qotishmalarning struktura va xossalari nanozarrachalarining ta'siri.....	61
Т.Ж. Қодиров, Ф.Ф. Фармонов, А.Ю. Тошев, Ш.Ш. Шойимов. Лазер нурлантириш орқали ишлов берилган Wet-blue чарм ярим махсулотнинг физик-механик хоссаларининг тадқиқоти.....	64
А.Х. Аликулов, Ф.Р. Норхужаев, Ф.А. Менгалиев. Мис асосли материаллардан олинган электродларни контактли пайвандлаш жараёни учун тадқиқ қилиш.....	68
Ш.А. Азимова, Т.У. Конгратаева, К.З. Султанов. Графит ва унинг модификацияларини сурков мойларига тўлдирувчи ва қуюклаштирувчи сифатида ўрганиш.....	70
T.Z. Daminov, S.Sh. Xabibullayev. Gazni kompleks tayyorlashda quritish texnologiyasi.....	73
Г.Х. Юсупова. Алюмоникелмолибденли катализатор ташувчисини яратишда фосфат кислотаси билан модификацияланган ташувчиларни ўрганиш.....	78
Н.Х. Талипов, С.С.Негматов, М.М. Улугова, З.Т. Мунаввархонов. Свойства цементнополимерных смесей гидроизоляционного назначения.....	81
Д.М. Тиллаева, М.С. Шарипов, Н.Ш. Паноев. Реологические модификаторы как регуляторы тиксотропности клеевых композиций на основе окисленного крахмала для гофрированных картонов.....	89
С.С. Негматов, М.Ш. Тухлиев, Ш. Абдуганиев, А.Я. Раззаков, Б.И. Хотамкулов, Н.С. Абед, О.Х. Эшкobilov. Исследование теплофизических свойств композиционных термореактивных полимерных материалов.....	93
С.Е. Калбаев, М.К. Рахимбердиева, С.Р. Отаджонов, Н.Т. Каттаев, Х.И. Акбаров. Получение наноструктурированного <i>IN SITU</i> композита на основе полипиррола.....	95
Г.Ш. Каримова, Н.Х. Бозорова, Э.Р. Тураев. Полибутилентрефталат ПБТ+АП таркибли композит материалнинг	