

O'zbekiston

Kompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал
Композиционные материалы

5. Z.A Smanova, N.I Nosirov, R.M Mirzaxmedov, B.N Mustafaev Sorbtion-Photometric Determination of rhenium ion using Immobilized Organic Reagent // International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology, 2020/1 С. 668-672.

6. Мирзахмедов Р. М., Мирусманова Ф.Б., «Олмалик КМК» АЖ корхонаси саноат кеки таркибидан никель ва кобальт ионларини сорбцион-фотометрик аниқлаш // Образование наука и инновационные идеи в мире, 2023/10/9 С. 140–143.

7. R.M Mirzakhmedov, M.N Jumayev, K.A Imomnazarova Sorbtion-photometric determination of zinc ion from the composition of industrial cake of non-ferrous metallurgical enterprises // Scholar's Digest- Journal of Multidisciplinary Studies 2023/4 С. 40-44

Аннотация. «Олмалик КМК» АЖ нинг саноат ва атроф-мухит объектларидаги оқава чиқинди технологик сувлари таркибидаги кобальт ионлари учун 2-нитрозо-1-нафтол органик аналитик реагент сифатида танлаб олинди. 2-нитрозо-1-нафтол органик реагентни хар хил толали ташувчиларга имобиллаши, кобальт ионларини аниқлаш, бундан ташқари аниқлашни экспресс усули кўрсатиб ўтилган.

Калит сўзлар: кобальт ионини, 2-нитрозо-1-нафтол, аналитик реагент, имобиллаш, сорбцион-фотометрик аниқлаш.

Жўраев Форход Холмурод ўғли

- Тошкент тиббиёт академияси академик лицейи кимё фани катта ўқитувчи

Мирзахмедов Рустамжон Мирхамидович

- И. Каримов номидаги Тошкент давлат техника университети Олмалик филиали, доценти, PhD

Сманова Зулайхо Асаналиевна

- Ўзбекистон миллий университети профессори, к.ф.д.

NAFTILKARBON KISLOTALAR SINTEZI REAKSIYASI MEXANIZMINI KVANT-KIMYOVIY USULDA TADQIQ ETISH

M. Kaxarova, M. Soliyev, X. Baxronov

Namangan muhandislik-texnologiya instituti

Annotatsiya. Ushbu maqolada 1-naftilsirka kislota sintezi bo'yicha xlorasetilpoliglikol va xlorisirka kislota molekullari uchun ionlanish potentsiali qiymatlari yuqori bog'lovchi molekulyar orbitallar energiyalaridan kelib chiqib, yarim empirik va noempirik usullarda aniqlandi. Bunda AM1, PM3 yarim empirik va DFT/BLYP/631G noempirik kombinatsion hisoblash metodlaridan foydalanildi.

α -Naftilsirka kislota sinteziga oid bir qancha usullar ma'lum [1]. Bayon etilgan ushbu usulda katalizator (metall birikmalari) qo'llanilmagan. Lekin adabiyotlarda keltirilishicha, alyuminiy metali, temir oksidi yoki xloridini qo'llash mahsulot unumini oshiradi. Shunga

qaramay, katalizatorlarning ta'sir mexanizmi haqidagi nazariy ma'lumotlar manbalarda uchramaydi. Shuning uchun quyida ushbu jarayonni bayon etamiz.

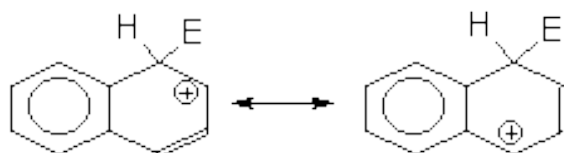
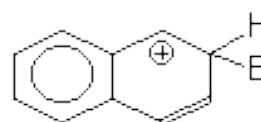
Naftalinga elektrofil almashinish reaksiyasi mexanizmi. Ma'lumki, naftalin kondensirlangan benzoid halqali aromatik sistema bo'lib, unga elektrofil reaksiyasi mexanizmi biroz noodatiyroq – ya'ni oraliq σ -kompleks hosil bo'lishi orqali amalga oshadi. Bu holatda barqarorlik energiyasining yo'qotilishi benzol yoki izolirlangan benzol yadrosidan iborat birikmalarga qaraganda ancha kam bo'ladi. Taqqoslash uchun ushbu energiyalarning qiymatlarini keltirib o'tamiz (1-jadval).

1-jadval.

Ароматик birikmalarda barqarorlashtiruvchi energiyaning yo'qotilishi

Birikma	Yo'qotiladigan barqarorlik energiyasi, kJ/mol		
	bitta halqada	markaziy halqada	tashqi halqada
Benzol	150	-	-
Naftalin	255	-	-
Bifenil	300	-	-
Antratsen	350	50	95
Fenantren	385	85	130

Ushbu qiymatlar quyidagicha keltirib chiqarilgan: masalan, fenantrenning barqarorlik energiyasi 385 kJ/mol, markaziy halqada aromatiklik buzilishi natijasida barqarorlik energiyasi 300 kJ/mol bo'lgan bifenil sistemasi qoladi. Binobarin, bu holda barqarorlik energiyasining yo'qotilishi 85 kJ/molga teng. Agar fenantrenning tashqi halqasida aromatiklik buzilsa, barqarorlik energiyasi 255 kJ/molga teng bo'lgan naftalin aromatik sistemasi qoladi. Bunda barqarorlik energiyasining yo'qotilishi 385 - 255 = 130 kJ/mol bo'ladi.

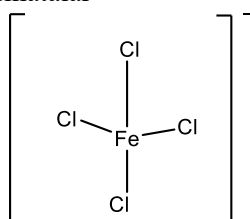
 α -holat uchun β -holat uchun

1-sxema. Naftalinning 2 xil holat uchun rezonans tuzilishlari.

Demak, naftalinda elektrofil almashinish reaksiyalari klassik mexanizmga ($S_E(Ar)$) ko'ra – arenoniy ionlarining hosil bo'lishi yoki birikish-parchalanish jarayoni orqali ionli mexanizm bilan amalga oshadi.

Jarayonda katalizatorning ishtiroki. Yuqorida keltirib o'tilganidek, kondensatsiya reaksiyasi unumi kukunsimon alyuminiy katalizatorligida boshlang'ich monoxlorsirka kislotasiga nisbatan hisoblaganda 40-50%, temir oksidi ta'sirida esa 5% foizga oshgan. Reaksiya uchun boshqa metallar va ularning birikmalari ham qo'llab ko'rilgan, biroq mahsulot unumining ortishiga yetarlicha ta'sir etmagan [2, 3, 4].

Naftalin molekulasini yassi tuzilishga ega bo'lib, uning ikki o'lchamli koordinatalar



Ushbu jarayonning amalga oshishini energetik jihatdan tahlil qilamiz. Ionlanish potentsiali va elektronga moyillik molekulaning elektron tuzilishini o'zida aks ettiruvchi muhim fizikaviy tavsif hisoblanadi. Bu kattaliklar turli xil fotokimyoviy, kimyoviy texnologiya, radiokimyoviy, biokimyoviy jarayonlarida, shuningdek, molekulyar va atom fizikasida, qattiq jismlar fizikasida va elektronikada molekulaning energetik holatini miqdoriy baholashda alohida o'rin tutadi [7].

Ta'kidlash joizki, bugungi kunda kvant-kimyoviy usullardan foydalanib, molekulaning ionlanish potentsiali va elektronga moyilligini yuqori aniqlikda hisoblab topish nazariy jihatdan katta ahamiyatga ega.

Bundan xulosa qilish mumkinki, naftalin, antratsen va fenantren birikmalari reaksiyaga benzol va izolirlangan benzol yadrolariga nisbatan osonroq kirishadi.

Naftalinning elektrofil almashinish reaksiyalarida elektrofil zarrachaning alfa- va beta-holatlariga hujumi jarayonida σ -kompleks hosil bo'lish bosqichida barqarorlik energiyasining yo'qotilishi bir xil qiymatga ega bo'ladi. Lekin hosil bo'ladigan arenoniy ioni uchun α -holatda 2 ta, β -holatda esa bitta qulay rezonans tuzilish kelib chiqadi (1-sxema).

sistemasida o'lchami ordinata o'qi bo'yicha 1-4 va 5-8 uglerodlar oralig'i ~ 0.278 nm, absissa o'qi bo'yicha 2-7 va 3-6 uglerodlar oralig'i ~ 0.481 nm ga teng [5, 6]

Xloratsetilpoliglikol kislotasining naftalin bilan kondensatsiyasini jadallashtirish uchun temir metallining katalizatorlik ta'sirini nazariy tadqiq qilamiz. Temir (II)-ionining koordinatsion soni 6 ga teng bo'lib, odatda uning kimyoviy bog'lanishi oktaedrik shaklda yo'nalgan bo'ladi. Lekin ligandlarning fazoviy hajmi katta bo'lishi natijasida (masalan, xlorid ioni) ligandlar o'rtasidagi kuchli itarishish tufayli temirning tetraedrik tuzilishli, nisbatan beqaror anion komplekslari yuzaga keladi.

Ishda mentol va timol molekullari uchun ionlanish potentsiali va elektronga moyillik qiymatlarini kvant kimyoning turli usullari yordamida aniqlash imkoniyatlari tahlil qilingan.

Molekula uchun adiabatik va vertikal ionlanish potentsiallari farqlanadi. Adiabatik ionlanish potentsiali asosiy holatdagi molekulaning ionlanish natijasida musbat ion hosil qilish hamda asosiy holatga qaytish jarayonlarini ifodalaydi. Vertikal ionlanish potentsiali esa molekuladan ion hosil bo'lish vaqtida molekulaning geometrik tuzilishini o'zgartirmagan holda tegishli kvant o'tishlarini ifodalovchi ixtiyoriy (elektron va to'lqin) energetik holatlarni tavsiflaydi.

Vertikal ionlanish potentsiali (IP) ni baholash Kupmans teoremasi bo'yicha YuBMO (yuqori bog'lovchi molekulyar orbital) energiyasi asosida bajarilgan:

$$IP_{vert} = -E_{YuBMO} \quad (1)$$

Adiabatik ionlanish potentsiali esa molekula va uning kationining umumiy elektron energiyalari farqi bilan hisoblanadi:

$$IP_{adiab} = \Delta E = E(M^+) - E(M) \quad (2)$$

bunda $E(M)$ – neytral molekulaning umumiy elektron energiyasi, $E(M^+)$ – neytral molekulaning geometrik konfiguratsiyasiga muvofiq kationning umumiy elektron energiyasi.

Vertikal elektronga moyillik (EM) qiymatini hisoblashning keng tarqalgan usuli Kupmans teoremasiga ko'ra quyidagicha bajariladi:

$$EM_{vert} = -E_{QBMO} \quad (3)$$

Shuningdek, ushbu qiymat neytral molekula uchun quyidagi usulda ham aniqlanadi:

$$EM_{vert} = \Delta E = E(M^-) - E(M) \quad (4)$$

bunda $E(M)$ – neytral molekulaning umumiy elektron energiyasi, $E(M^-)$ – neytral molekulaning geometrik konfiguratsiyasiga muvofiq anionning umumiy elektron energiyasi.

Adiabatik elektronga moyillik ham (4) tenglamaga muvofiq hisoblanadi, lekin bu holda E

(M^-) sifatida umumiy elektron energiyasi anion uchun geometrik optimallashtirib olinadi [106; 27-34; 107; 827-851-b.].

Biz elektronga moyillik qiymatini hisoblashning keltirib o'tilgan usullaridan tashqari quyidagi (5) tenglama bilan baholashni taklif etamiz. Ushbu tenglamaga neytral molekulaning E_{YuBMO} va E_{QBMO} qiymatlari hamda neytral molekulaning vertikal ionlanish potentsiali (neytral molekula $E(M)$ va kation $E(M^+)$ ning umumiy elektron energiyalari ayirmasi) kiritilgan.

$$EM = -(E_{YuBMO} + E_{QBMO}) - IP \quad (5)$$

bunda $IP = E(M^+) - E(M)$.

Bu usul elektron qo'shish yoki olib tashlash bilan kelib chiquvchi kation va neytral molekula haqidagi ma'lumotlarga tayanib, anion energiyasini keltirib chiqarishda foydalaniladi va hisoblashdagi xatolikni kompensatsiyalaydi.

Mazkur nazariy tadqiqot davomida o'xshash tuzilishli xlorasetilpoliglikol va xlorisirka kislota molekulalari va ionlarining umumiy energiyasi va molekulyar orbitallar energiyalari AM1 va RM3 yarim empirik usullarida hisoblandi.

Quyidagi 2-jadvalda xlorasetilpoliglikol va xlorisirka kislota molekulalarining vertikal va adiabatik ionlanish potentsiallari keltirilgan.

2-jadval

Xlorasetilpoliglikol va xlorisirka kislota molekulalarining vertikal va adiabatik ionlanish potentsiallari

Hisoblash usuli	Molekula	IP_{vert} , eV	IP_{adiab} , eV
AM1	Xlorasetilpoliglikol kislota	-22,83	13,14
PM3		-98,51	13,23
DFT/BLYP/631G		-16,68	11,42
AM1	Xlorisirka kislota	-7,67	8,98
PM3		-7,44	10,42
DFT/BLYP/631G		-3,35	10,38

Shuningdek, ushbu moddalar molekulalarining elektronga moyillik qiymatini 3 va 4 tenglamalarga muvofiq hisoblandi (3-jadval).

3-jadval

Mentol va timol molekulalarining elektronga moyillik qiymati

Molekula	Hisoblash usullari	E_{QBMO}	EM_{vert} , eV	EM_{adiab} , eV
			3 tenglama	4-tenglama
Xlorasetilpoliglikol kislota	AM1	3,37	-3,37	0,47
	PM3	3,14	-3,14	0,13
	DFT/BLYP/631G	1,90	-1,90	16,92
Xlorisirka kislota	AM1	0,38	-0,38	-2,06
	PM3	0,27	-0,27	-1,77
	DFT/BLYP/631G	0,15	-0,15	15,79

Зойиров А.У, Маматалиев А.А., Намазов Ш.С. Неслѣживающаяся аммиачная селитра на основе плава нитрата аммония и глауберской соли Тумрюкского месторождения	203
Тўрахўжаева Ш.Н., Тожибоев Х.К., Тураходжаев Н.Д., Абдувалиев А.М., Абдурахмонов Х.З., Носирхўжаев И.А., Тўрахўжаева А.Н. Алюминий қотишмаларининг таркибига литийни қўшишда куйиш микдорини камайтириш учун унинг юзасига химоя қатламини ҳосил қилиш технологияси.....	206
Талипов Н.Х., Матякубова К.Ш., Курамбаев Ш.Р. Получение и исследование физико-механических свойств композиционных гипсовых материалов для производства отделочных и реставрационных работ..	207
Жунсалиева Г.А., Тогаев А.У., Каттаев Н.Т., Акбаров Х.И., Мамадалимов А.Т. Исследование электропроводимости <i>IN SITU</i> композита «целлюлоза – политиофен»	209
Талипов Н.Х., Абдуллаев М.А. Влияние микрокремнезема на реологические свойства цементно-микрокремземистой композиции для получения материалов ячеистой структуры.....	212
У.Д. Шерқулов. Ўрилган композицион мато ва маҳсулотлар олишда хом ашё тури ва рангидан самарали фойдаланишга ёндашув.....	215

7. Вести из лаборатории

S.R. Otajonov, N.T. Kattayev, H.I. Akbarov, A.T. Mamadalimov, Sh.M. Norbekov. Polivinilimidazol asosidagi elektr o'tkazuvchan polimerning sintezi va volt-ampere tavsifi	218
М.И. Искандарова, Д.Д. Мухитдинов, Г.П. Чернишева, Д.У. Ахмедова. Исследование сульфатостойкости цементов с высококремнеземистыми активными минеральными добавками	223
С.И. Номозова, Н.И. Файзуллаев, Д.Р. Хамидов. Пропанни каталитик ароматлаш учун танланган катализаторларнинг физик-химий ва каталитик характеристикалари	226
Н.С. Абед. Фрикционные композиционные материалы для тормозов автотракторной техники	228
А.Н. Бозоров. Разработка способа переработки огарка промпродукта молибдена и отходов молибденового производства	230
Астанакулов К.Д., Калауов С.А., Джабаров Ж.Х., Улашов Ж.З., Тошмирзаев М.А. Восстановления изношенных деталей для измельчения отходов веток деревьев методом газопламенного напыления.....	233
N.S. Abed. Acoustic environmentally friendly composites to reduce noise in production facilities and transportation	234
О.Ж. Мелиқулов, Д.Қ. Холмуродова. Хомашё намлигининг брикет мустаҳкамлигига таъсирини ўрганиш.....	238
N.S. Abed. Sound absorption of rice husk as promising biomass filler of noise reducing composites	240
М.У. Рахмонов, А.С. Менглиев, Н.Г. Валеева. Разработка новых, импортозамещающих смазочно-охлаждающих жидкостей с использованием местного сырья	242
Д.Х. Ҳамдамов, Ч.Х. Ҳамдамова, Т.О. Камолов. Ангрен ва Янги-Ангрен ИЭС кул чиқиндиларидан металлларни ажратиш олиш кинетикаси	244
М. Исламова. Методика и алгоритмы конструирования одежды в контексте цифровых технологий	247
U.S. Raxmatullayeva, K.B. Mirziyodova, N.M. Mirfayazova, D.Yu. Elmuradova. Kostyumni loyihalashda shaklni hosil qilish qonuniyatlari.....	250
Д.М. Таваккалова, М.М. Собиров, Б.Э. Султонов, А.А. Нишонов. Фосфат хомашёсини кислотали бойитиш чиқиндисидан суюқ азот-кальцийли ўғитлар олиш	255
Т.С. Халимжанов. Исследования влияния технологических факторов на триботехнических свойства модифицированных композиционных материалов	259
Д.М. Таваккалова, М.М. Собиров, Б.Э. Султонов, Р.К. Мамадалиев. Мураккаб фосфор-калийли ўғитларнинг физик-механик ва товар хоссалари	261
U.S. Raxmatullayeva, S.A. Raximqulova, M.E. Hasanova, K.B. Mirziyodova, S.J. Oxunova. Surxondaryo milliy matolarining fizik-mexanik xususiyatlarini tadqiq qilish.....	265
G. Dadaxanova, M. Kaxarova, M. Soliyev, X. Baxronov. Piroliz moyining turlari, ularning tarkibini aniqlash va moddalarni ajratish usullari.....	270
С.С. Негматов, Б.М.Тожибоев, Т.У. Улмасов, Н.С. Абед. Исследование влияния внутренних напряжений на долговечность полимерных и лакокрасочных материалов и возможности их понижения различными технологическими приемами с целью повышения срока службы получаемого покрытия	274
Ф.Х. Жўраев, Р.М. Мирзахмедов, З.А. Сманова. Кобальт (II) ионини сорбцион-фотометрик аниқлаш усулини ишлаб чиқариш.....	277
М. Kaxarova, M. Soliyev, X. Baxronov. Naftilkarbon kislotalar sintezi reaksiyasi mexanizmini kvant-kimyoviy usulda tadqiq etish.....	279
Т.Ж. Қодиров, С.А. Маматкаримов, Ш.Ш. Шойимов. Выявление клеящую способность адгезивов на основе модифицированного мездрового клея	282
Ф.Х. Жўраев, Р.М. Мирзахмедов, З.А. Сманова. Никель (II) ионини сорбцион-фотометрик аниқлаш усулини ишлаб чиқиш	286