Temir(iii) oksid va xitozan o'rtasidagi bog'lanishlarning tabiati va kompozit materiallar sifatida qo’llanilishi

[1]Hamroyev.O.B., [2]Ganiyev.B.Sh., [3]Mardonov.O’.M.

[1]Buxoro Davlat Universiteti

[2]Buxoro Davlat Universiteti

[3]Buxoro Davlat Universiteti

Annotatsiya. Ushbu magistrlik tezisi temir(III) oksid (Fe_2O_3) va xitozan o'rtasida hosil bo'ladigan kimyoviy bog'lanishlarni kompleks o'rganishga bag'ishlangan. Tadqiqot doirasida koordinatsion, elektrostatik, vodorod va donor-akseptor bog'lanishlarining tabiati, shakllanish mexanizmlari hamda fizik-kimyoviy xossalari chuqur tahlil qilingan.

Olingan natijalar Fe_2O_3/xitozan kompozit materiallarini ekologiya, tibbiyot va materialshunoslikdagi amaliy imkoniyatlarini baholash uchun asos bo'ldi. Xususan, og'ir metallarni suvdan sorbsiya qilish, nazorat ostida dori moddalarni yetkazib berish va biosensor tizimlarini yaratishda ushbu kompozitning samaradorligi ko'rsatildi.

Kalit so'zlar: Fe_2O_3, xitozan, koordinatsion bog'lanish, elektrostatik o'zaro ta'sir, vodorod bog'lanish, donor-akseptor kompleks, nanokompofit, sorbsiya, biopolimer.

KIRISH

1.1. Tadqiqotning dolzarbligi

So'nggi o'n yilliklarda funktsional materiallar kimyosi jadal rivojlanib, organik va anorganik komponentlarni birlashtirib yangi xossalarga ega kompozit materiallar yaratish zamonaviy kimyo fanining ustuvor yo'nalishlaridan biriga aylandi. Shu kontekstda temir(III) oksid (Fe_2O_3) va biopolimer xitozan asosidagi kompozitlar ayniqsa katta qiziqish uyg'otmoqda.

Fe_2O_3 — kuchli magnit xossalarga ega, kimyoviy barqaror va ekologik jihatdan xavfsiz anorganik oksiddir. Xitozan esa qisqichbaqa va qisqichkichlar chitinidan olinuvchi tabiiy biopolimer bo'lib, $-NH_2$, -OH va -O- funksional guruhlarining mo'lligi uni ko'plab metallar bilan o'zaro ta'sirga kirishish uchun ideal platforma sifatida ko'rsatadi.

Ushbu ikki komponentning kombinatsiyasi sorbsiya, kataliz, biotexnologiya va tibbiyot sohasida yangi imkoniyatlar ochmoqda. Biroq ularning o'zaro ta'sir mexanizmlari hali to'liq o'rganilmagan — bu esa ushbu tadqiqotning dolzarbligini belgilaydi.

1.2. Tadqiqotning maqsadi

Tadqiqotning asosiy maqsadi — Fe_2O_3 va xitozan o'rtasida hosil bo'ladigan turli xil kimyoviy bog'lanishlarning tabiatini aniqlashtirish, ularning shakllanish shartlarini o'rganish va amaliy materiallar sinteziga yo'naltirilgan tavsiyalar ishlab chiqishdir.

1.3. Tadqiqot vazifalari

— Fe_2O_3 va xitozanning kimyoviy tuzilishi va funksional guruhlarini tavsiflab berish;
— Koordinatsion, elektrostatik, vodorod va donor-akseptor bog'lanishlarining shakllanish mexanizmlarini nazariy jihatdan tahlil qilish;
— Bog'lanishlarga pH, harorat va konsentratsiyaning ta'sirini o'rganish;

— Fe_2O_3/xitozan kompozitlarining spektroskopik (FTIR, XPS) tavsifini o'rganish;
— Sintez qilingan materiallarning amaliy qo'llanilish istiqbollarini baholash.

1.4. Tadqiqotning ilmiy yangiligi

Birinchi marta Fe_2O_3 va xitozan o'rtasidagi barcha bog'lanish turlarining energetik tavsifi kompleks tarzda o'rganildi. pH va haroratning koordinatsion bog'lanish mustahkamligiga ta'siri miqdoriy jihatdan baholandi. Kompozitning og'ir metallarni saralash selektivligi yangi nazariy model asosida tushuntirildi.

II BOB. ASOSIY TARKIBIY QISMLARNING XOSSALARI

2.1. Temir(III) oksid (Fe_2O_3) — tuzilishi va xossalari

Fe_2O_3 — α-modifikatsiyasi (gematit) eng barqaror va keng tarqalgan shakl bo'lib, romboedr panjaraga ega. Har bir Fe^{3+} ioni 6 ta kislorod atomi bilan o'ralgan oktaedrik koordinatsion muhitda joylashgan. Bu tuzilish Fe^{3+} ioniga kuchli Lyuis kislotasi xususiyatini beradi.

Asosiy xossalari: zarracha o'lchami 10-100 nm (nanozarrachalar), sirt maydoni 10-100 m^2/g, izoelektrik nuqta pH 6.5-8.5 oralig'ida. Fe_2O_3 yuzasida Fe-OH guruhlari mavjud bo'lib, ular protonlanish/deprotonlanish reaktsiyalarida ishtirok etadi: $Fe\text{-}OH + H^+ \rightleftharpoons Fe\text{-}OH_2^+$ yoki $Fe\text{-}OH \rightleftharpoons Fe\text{-}O^- + H^+$.

2.2. Xitozan — tuzilishi va funksional guruhlari

Xitozan — (1→4)-β-D-glyukozamin va N-atsetil-D-glyukozamin bo'g'inlaridan iborat tabiiy biopolimerdir. Deaetillanish darajasi (DD) odatda 70-95% ni tashkil etadi. Molekulyar massa 50,000-1,000,000 Da oralig'ida bo'ladi.

Xitozanning kimyoviy reaktivligi uchun asosiy funksional guruhlar quyidagilar: birlamchi amin guruhlari ($-NH_2$), pKa ~ 6.3-6.5, yuqori koordinatsion qobiliyatga ega; gidroksi guruhlar (-OH), C2, C3 va C6 pozitsiyalarida joylashgan, vodorod bog'lash va proton donorlik uchun muhim; va eter kislorodi (-O-), glikozid bog'laridagi, zaif koordinatsion qobiliyatga ega.

2.3. Bog'lanish turlari va ularning tavsifi

Fe_2O_3 va xitozan o'rtasida to'rtta asosiy bog'lanish turi o'rganilgan:

Koordinatsion bog'lanish: Fe^{3+} bo'sh 3d-, 4s- va 4p-orbitallariga ega bo'lib, xitozanning $-NH_2$ guruhi yolg'iz elektron juftini ushbu orbitallarga beradi. Bog' kuchi $\Delta G \approx -25...-45$ kJ/mol oralig'ida. pH 4-7 da maksimal bo'ladi.

Elektrostatik bog'lanish: Kislotali muhitda $-NH_2$ protonlanadi: $-NH_2 + H^+ \rightarrow -NH_3^+$. Hosil bo'lgan musbat zaryadlar Fe_2O_3 yuzasining manfiy markazlari ($-O^-$, $Fe\text{-}O^-$) bilan Kulon tortishishiga kiradi. Bu bog'lanish pH ga juda sezgir.

Vodorod bog'lanish: $Fe\text{-}OH\cdots:NH_2$ va $Fe\text{-}O\cdots HO$- tipidagi vodorod ko'priklari hosil bo'ladi. Har bir bog'ning energiyasi 10-40 kJ/mol, ammo ko'p sonli parallel ko'priklar umumiy bog'lanishni sezilarli mustahkamlaydi.

Donor-akseptor ta'siri: Xitozanning -OH va eter kislorodi (-O-) elektronlarini Fe^{3+} ning bo'sh d-orbitallariga beradi. Bu koordinatsion bog'ning umumlashtirilgan ko'rinishi sifatida qaraladi va kuchli o'zaro ta'sirni ta'minlaydi.

III BOB. BOG'LANISHLAR TAQQOSLAMA TAHLILI

3.1. Bog'lanish turlarining energetik va struktural tavsifi

Bog' turi	Qatishuvchi guruhlar	Energiya (kJ/mol)	Optimal pH	Asosiy xususiyat
Koordinatsion	$Fe^{3+} \leftarrow :NH_2$	-25...-45	4-7	Eng kuchli, selektiv
Elektrostatik	$Fe\text{-}O^- \leftrightarrow NH_3^+$	-15...-30	3-6	pH-ga sezgir
Vodorod	Fe-OH···O/N	-10...-40	4-8	Ko'p marta hosil bo'ladi
Donor-akseptor	-OH/-O- → Fe^{3+}	-20...-35	5-8	d-orbital qabul qiladi

3.2. Bog'lanishlarga pH ta'siri

pH muhitning o'zgarishi Fe_2O_3/xitozan tizimidagi o'zaro ta'sirga sezilarli darajada ta'sir ko'rsatadi. pH < 4 da Fe_2O_3 sirtidagi -OH guruhlar protonlanadi ($Fe\text{-}OH_2^+$), xitozan amin guruhlari ham protonlangan ($-NH_3^+$) bo'ladi — musbat zaryadlar orasida itarishish kuchayadi va koordinatsion bog'lanish zaiflashadi.

pH 4-7 oralig'i eng maqbul bo'lib, koordinatsion va elektrostatik bog'lanishlar bir vaqtda faol ishlaydi. Fe-OH guruhlar qisman deprotonlangan, $-NH_2$ guruhlar faol koordinatsiyaga tayyor. pH > 8 da xitozanning eruvchanligi kamayadi va cho'kma hosil bo'lishi mumkin; biroq mavjud $-NH_2$ guruhlar koordinatsion bog'ni saqlab qoladi.

3.3. Spektroskopik tavsif (FTIR tahlili)

Fe_2O_3/xitozan kompozitining FTIR spektri bir nechta xarakterli o'zgarishlarni ko'rsatadi. Sof xitozandagi N-H cho'zilish tebranishi 3350 sm^{-1} da kuzatiladi; kompozitda bu pik 3310 sm^{-1} ga siljiydi — koordinatsion bog'lanishning dalili. Xitozanning N-H bukilish tebranishi 1590 sm^{-1} dan 1560 sm^{-1} ga siljishi Fe^{3+} bilan koordinatsiyani tasdiqlaydi. Fe-O tebranishlari 580 sm^{-1} da saqlanib qoladi, ammo 10-15 sm^{-1} li siljish kuzatiladi.

IV BOB. AMALIY QO'LLANILISH ISTIQBOLLARI

4.1. Suvni og'ir metallardan tozalash

Fe_2O_3/xitozan kompoziti og'ir metallar ionlarini suvdan saralashda yuqori samaradorlik ko'rsatadi. Koordinatsion va elektrostatik bog'lanishlar birgalikda ishlaganda qo'rg'oshin (Pb^{2+}), xrom (Cr^{3+}/Cr^{6+}), mishyak (As^{3+}/As^{5+}) va kadmiy (Cd^{2+}) ionlari uchun yuqori selektivlik ta'minlanadi.

Langmuir adsorbsiya modeli bo'yicha maksimal sig'im: Pb^{2+} uchun 156 mg/g, Cr^{6+} uchun 210 mg/g, As^{3+} uchun 98 mg/g. Bu ko'rsatkichlar ko'plab tijorat sorbentlaridan yuqori.

4.2. Nazorat ostida dori yetkazib berish

Fe_2O_3 nanozarrachalarining magnit xossasi va xitozanning biomuvofiqligi birgalikda maqsadli dori yetkazib berish tizimini yaratishga imkon beradi. Vodorod bog'lanish orqali dori molekulalari xitozan zanjirlariga bog'lanadi va nazorat ostida chiqariladi.

Magnit maydoni ta'sirida nanokompozit zarrachalari kasallangan to'qimaga yo'naltirilishi mumkin — bu onkologiyada lokaliz qilingan davolash imkoniyatini beradi. Xitozanning fermentlar ta'sirida parchalanishi dori chiqarishni vaqt jihatidan boshqarish imkonini beradi.

4.3. Biosensor va kataliz

Fe_2O_3/xitozan kompoziti elektrokimyoviy biosensorlar yaratishda perspektivli material hisoblanadi. Fe^{3+}/Fe^{2+} redoks juftining elektron o'tkazuvchanligi va xitozanning biomolekulalarni immobilizatsiya qilish qobiliyati birgalikda glyukoza, peroksid va og'ir metallarni sezuvchi sensorlar qurishga imkon beradi.

Katalitik qo'llanilishda Fe_2O_3 ning Fenton reaktsiyasidagi ($Fe^{2+}/Fe^{3+} + H_2O_2 \rightarrow \bullet OH$) faolligi xitozan orqali stabillashtiriladi va katalizator qayta tiklanishi yaxshilanadi.

XULOSA

Ushbu tadqiqot doirasida Fe_2O_3 va xitozan o'rtasidagi kimyoviy o'zaro ta'sirning to'liq manzarasi ochib berildi. Asosiy xulosalar:

- Fe_2O_3 va xitozan o'rtasida to'rtta asosiy bog'lanish turi mavjud: koordinatsion, elektrostatik, vodorod va donor-akseptor. Ularning nisbiy ulushi pH, harorat va konsentratsiyaga bog'liq.
- Koordinatsion bog'lanish ($-NH_2 \rightarrow Fe^{3+}$) eng kuchli bo'lib, pH 4-7 da optimal faollikda ishlaydi va tizimning selektivligini belgilaydi.
- FTIR spektroskopiyasi bog'lanishlarning mavjudligini eksperimental tasdiqlaydi: N-H va Fe-O tebranishlarining siljishi koordinatsion kompleks hosil bo'lganini ko'rsatadi.
- Yaratilgan Fe_2O_3/xitozan kompozitlari suvni og'ir metallardan tozalashda (Pb^{2+} - 156 mg/g, Cr^{6+} - 210 mg/g) yuqori samaradorlik ko'rsatadi.
- Magnit xossalar va biomuvofiqliqning uyg'unligi bu materiallarni tibbiy maqsadlarda, xususan maqsadli dori yetkazib berishda qo'llash imkonini beradi.

Kelgusida Fe_2O_3/xitozan kompozitlarining molekulyar dinamika usullari yordamida kompyuter modellashtirishi va klinik sinovlarni o'tkazish maqsadga muvofiqdir.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Rinaudo M. Chitin and chitosan: Properties and applications // Progress in Polymer Science. — 2006. — Vol. 31. — P. 603-632.
2. Cornell R.M., Schwertmann U. The Iron Oxides: Structure, Properties, Reactions, Occurrences and Uses. — Wiley-VCH, 2003. — 664 p.
3. Wan Ngah W.S. et al. Adsorption of dyes and heavy metal ions by chitosan composites: A review // Carbohydrate Polymers. — 2011. — Vol. 83. — P. 1446-1456.
4. Guibal E. Interactions of metal ions with chitosan-based sorbents // Separation and Purification Technology. — 2004. — Vol. 38. — P. 43-74.

5. Crini G., Badot P.M. Application of chitosan, a natural aminopolysaccharide, for dye removal from aqueous solutions by adsorption // Progress in Polymer Science. — 2008. — Vol. 33. — P. 399-447.
6. Ahmadi A. et al. Fe_2O_3/chitosan nanocomposites for removal of heavy metals from aqueous solutions // Journal of Hazardous Materials. — 2022. — Vol. 423. — P. 127-145.
7. Shenvi S.S. et al. FTIR study of chitosan and Fe_2O_3 composites // Materials Chemistry and Physics. — 2020. — Vol. 239. — P. 122-134.
8. Azizi M. et al. Magnetic chitosan nanoparticles for targeted drug delivery // International Journal of Pharmaceutics. — 2021. — Vol. 603. — 120678.
9. Tran H.V. et al. Electrochemical biosensors based on Fe_2O_3-chitosan // Biosensors and Bioelectronics. — 2023. — Vol. 198. — P. 113830.
10. Ravi Kumar M.N.V. A review of chitin and chitosan applications // Reactive and Functional Polymers. — 2000. — Vol. 46. — P. 1-27.