

**SMA-1 POLIMER IONITI BILAN KOBALT (CO) IONINING O'ZARO TA'SIRI:
GAMESS DASTURIDA KVANT-KIMYOVIY MODELLASHTIRISH**

Jumanazarova G

Qodirova R A

Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch Davlat Universiteti magistranti

Abduraxmonova T R

Gafurova D A

Shahidova D N

Ranch texnologiya universiteti O'zbekiston Milliy universitet

Annotatsiya: Mazkur maqolada SMA-1 polimer ionitining kobalt (II) ionini bilan o'zaro ta'siri kvant-kimyoviy modellashtirish orqali o'rganildi. Tadqiqot GAMESS dasturi yordamida DFT usuli asosida, B3LYP funksionali va 6-31G(d) asos to'plamidan foydalanib olib borildi. Hisoblash natijalari SMA-1 polimerining amidoksim va guanidin guruhlarini orqali Co(II) ionini kuchli koordinatsiya qilishini ko'rsatdi. Optimallashtirilgan geometriya ikki xelat halqa hosil bo'lishini tasdiqladi. Bog'lanish energiyasi -55.6 kkal/mol bo'lib, bu barqaror kompleks hosil bo'lishini anglatadi. HOMO-LUMO farqi 3.84 eV ni tashkil etdi, bu esa kompleksning elektron barqarorligini ko'rsatadi. Elektron zichlik taqsimoti va elektrostatik potensial xaritalari ion-polimer o'zaro ta'sirlarining lokal tabiatini aniqlash imkonini berdi. Natijalar SMA-1 polimerining og'ir metall ionlarini selektiv ajratish va samarali sorbent sifatida ishlatish imkoniyatlarini kengaytiradi.

Kalit so'zlar: SMA-1, polimer ionit, kobalt (Co^{2+}), GAMESS, kvant-kimyo, amidoksim, guanidin, modellashtirish

KIRISH

Hozirgi davrda ekologik xavfsizlik muammolari jahon miqyosida eng dolzarb masalalardan biri sifatida e'tirof etilmoqda. Sanoat ishlab chiqarishining jadallashuvi natijasida hosil bo'ladigan oqova suvlar va chiqindilar tarkibida og'ir metall ionlarining mavjudligi atrof-muhitga hamda inson salomatligiga katta xavf tug'dirmoqda. Og'ir metallar tabiiy muhitda biologik parchalanmaydi va tuproq, suv hamda havoda to'planib boradi. Natijada ular oziq-ovqat zanjiri orqali inson va hayvon organizmlariga kirib, uzoq muddatli toksik ta'sir ko'rsatishi mumkin [1,2].

Kobalt (Co) ionlari bunday muammolarning yaqqol misolidir. Kobalt tirik organizmlarda muhim biologik rol o'ynaydi: u vitamin B₁₂ ning markaziy atomidir, gemopoetik tizim faoliyatida ishtirok etadi va ba'zi fermentlarning tarkibiy qismini tashkil qiladi. Ammo uning ortiqcha miqdorda to'planishi sog'liq uchun xavfli bo'lishi mumkin. Kobalt ionlarining ortiqcha konsentratsiyasi yurak-qon tomir kasalliklari, o'pka va jigar faoliyatida buzilishlar, shuningdek allergik reaksiyalarni keltirib

chiqarishi aniqlangan. Shu sababli sanoat chiqindilaridan kobaltni ajratib olish ekologik va tibbiy nuqtayi nazardan dolzarb hisoblanadi.

Kobalt ionlarini tabiatdan ajratish uchun turli usullar qo'llaniladi: kimyoviy cho'ktirish, membranali filtratsiya, elektrokoagulyatsiya, suyuqlik-suyuqlik ekstraksiyasi va ion almashinish usullari. Biroq ushbu metodlarning barchasi bir qator kamchiliklarga ega: yuqori energiya sarfi, chiqindilar hosil bo'lishi, selektivlikning pastligi yoki iqtisodiy jihatdan qimmatligi. Ion almashinish materiallari, xususan funksional guruhlariga ega bo'lgan polimer ionitlar, bu muammolarni hal etishda eng istiqbolli yo'nalishlardan biri hisoblanadi.

Polimer ionitlar sorbsiya jarayonida metall ionlarini bog'lash uchun turli kimyoviy guruhlariga ega bo'ladi. Bu guruhlar ion almashinish, kompleks hosil qilish yoki vodorod aloqalari orqali ishlaydi. Ayniqsa amidoksim va guanidin guruhlariga ega bo'lgan polimerlar og'ir metall ionlarini samarali ajratishda katta imkoniyatlarga ega. Amidoksim guruhlar $-C(NO_2)NH_2$ fragmenti tufayli kislorod va azot donor atomlari orqali o'tish metall ionlari bilan kuchli xelat komplekslari hosil qilishi mumkin. Guanidin guruhlar esa kuchli bazik xususiyatlarga ega bo'lib, metall ionlari bilan elektron donor-akseptor aloqalari o'rnatadi.

SMA-1 polimeri o'zining tarkibida akrilonitril, amidoksim, akrilamid va guanidin fragmentlarini o'z ichiga oladi. Bunday murakkab arxitekturaga ega bo'lgan polimer metall ionlarini selektiv ravishda bog'lashga mo'ljallangan. Ayniqsa, kobalt ionlari bilan o'zaro ta'siri nazariy va amaliy jihatdan qiziqish uyg'otadi. SMA-1 polimerining samarali kompleks hosil qilish xususiyatini tushuntirib berish va oldindan baholash uchun kvant-kimyoviy modellashtirish usullari qo'llaniladi [2,3].

Kvant-kimyoviy hisoblashlar molekullarning elektron tuzilishini chuqur o'rganish, bog'lanish energiyalarini aniqlash, zaryad va elektron zichlik taqsimotini baholash imkonini beradi. Shu sababli SMA-1 polimerining $Co(II)$ ionlari bilan o'zaro ta'sirini modellashtirish orqali sorbentning samaradorligi haqida aniq nazariy xulosalar chiqarish mumkin.

ADABIYOTLAR TAHLILI

Kobalt va boshqa og'ir metall ionlarini ajratish masalasiga oid ko'plab ilmiy ishlar mavjud. Ularning tahlili shuni ko'rsatadiki, sorbent sifatida turli materiallar qo'llanilgan bo'lsa-da, funksional guruhlariga ega bo'lgan polimer ionitlar yuqori selektivlik va barqarorlik bilan ajralib turadi.

Schmidt va hamkorlari tomonidan ishlab chiqilgan GAMESS dasturi kvant-kimyoviy modellashtirishda asosiy vositalardan biridir. Bu dastur elektron zichlikni hisoblash, molekulyar orbitallarni tahlil qilish, energiya parametrlarini aniqlash imkonini beradi [4]. Shu tufayli ko'plab tadqiqotchilar metall ionlari va polimer sorbentlar o'rtasidagi o'zaro ta'sirlarni aynan ushbu dastur yordamida o'rganib kelmoqda. GAMESS dasturida zichlik funksional nazariyasi (DFT) bilan birga turli funksionallar qo'llaniladi, ulardan B3LYP funksionali eng ko'p ishlatiladigan variantlardan biridir.

Kang va boshqalar yeryong'oq qobig'idan tayyorlangan faollashtirilgan uglerod asosida og'ir metall ionlarini adsorbsiyalashni tadqiq etganlar[5]. Ularning natijalari biomateriallarga asoslangan sorbentlar iqtisodiy jihatdan arzon va ekologik toza ekanini ko'rsatdi. Biroq bunday sorbentlarning asosiy kamchiligi selektivlikning pastligi bo'lib, ular turli ionlarga nisbatan bir xil ta'sir ko'rsatadi. Shu sababli polimer ionitlar kabi maxsus dizaynga ega materiallar bilan solishtirganda ularning samaradorligi cheklangan.

Wang va hamkorlari amidoksim funksional guruhlari bilan modifikatsiyalangan polimerlarning metall ionlariga nisbatan yuqori affinitetini o'rganib chiqdilar [6]. Ularning tadqiqotida amidoksim guruhining $-C(NO_2)NH_2$ fragmenti kislorod va azot donor atomlari orqali o'tish metall ionlari bilan mustahkam xelat komplekslari hosil qilishini ko'rsatib berildi. Shu bois amidoksim guruhlari selektiv sorbentlar yaratishda asosiy funksional komponent sifatida qaraladi.

Frenking va Krapp 2007 yilda o'z tadqiqotlarida o'tish metall komplekslarida bog'lanish tabiatini chuqur tahlil qildilar [7]. Ular donor va akseptor orbitalar o'rtasidagi elektron almashinuv, gibridlanish hamda kovalent va ionik komponentlarning o'zaro uyg'unligini ko'rsatdilar. Bu yondashuv SMA-1 polimerining Co(II) ionlari bilan o'zaro ta'sirini tushuntirish uchun ham dolzarb, chunki polimer donor atomlari (O va N) va Co(II) ionining bo'sh orbitalari o'rtasida xuddi shunday elektron almashinuv yuz beradi.

Shuningdek, boshqa tadqiqotlar ham ko'rsatadiki, amidoksim va guanidin guruhlarga ega polimerlar turli metall ionlarini selektiv bog'laydi. Masalan, ayrim ishlar kadmiy va qo'rg'oshin ionlari bilan kuchli kompleks hosil bo'lishini qayd etgan. Bu natijalar polimerning turli metall ionlariga nisbatan selektivligini nazariy va amaliy jihatdan tushuntirish imkonini beradi.

Yuqoridagi adabiyotlar tahlili shuni ko'rsatadiki, SMA-1 polimerining Co(II) ionlari bilan o'zaro ta'sirini kvant-kimyoviy modellashtirish orqali o'rganish ilmiy asosli va dolzarb hisoblanadi. Schmidt va boshqalarning ishlari metodologik asos bo'lsa, Kang va hamkorlarining tadqiqotlari sorbentlarning umumiy samaradorligini yoritadi. Wang va hamkorlarining natijalari amidoksim guruhining yuqori selektivligini ko'rsatib bersa, Frenking va Krappning ishlari bog'lanish tabiatini tushuntirish imkonini beradi.

MATERIALLAR VA METODLAR

Mazkur tadqiqot SMA-1 polimer ionitining kobalt (II) ionlari bilan o'zaro ta'sirini kvant-kimyoviy usullar yordamida o'rganishga qaratildi. Hisoblashlar General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) dasturiy majmuasi yordamida amalga oshirildi [4]. GAMESS dasturi turli nazariy yondashuvlar va funksionallar asosida molekularlarning elektron tuzilishini tahlil qilish imkonini beradi.

Model tuzish. SMA-1 polimerining butun makromolekulasini hisoblash katta hajmli va murakkab bo'lgani sababli, polimerning ion almashinish jarayonida ishtirok

etadigan faol fragmenti tanlab olindi. Bu fragment amidoksim va guanidin guruhlarini o'z ichiga oladi, chunki ular kobalt ionlarini bog'lashda asosiy donor markazlari hisoblanadi. Shunday qilib, hisoblashlarda polimerning "faol yadro modeli"dan foydalanildi.

Hisoblash usuli. Dastlabki struktura Avogadro molekulyar vizualizatsiya dasturida tuzildi va GAMESS formatiga o'tkazildi. Geometriya optimallashtirish va elektron zichlikni hisoblash uchun Zichlik funksional nazariyasi (DFT) qo'llanildi. DFT o'zining hisoblash samaradorligi va aniqligi sababli o'tish metall komplekslari uchun keng qo'llaniladi.

Funksional va asos to'plam tanlovi. Hisoblashlarda B3LYP funksionali ishlatildi. B3LYP (Becke's Three Parameter Hybrid Functional with Lee-Yang-Parr correlation) – gibrid funksional bo'lib, almashinish va korrelyatsiya energiyasini aniq hisoblash imkonini beradi. Ushbu funksional metall komplekslarining bog'lanish energiyasi va elektron tuzilishini aniqlashda yaxshi natijalar beradi. Asos to'plami sifatida 6-31G(d) tanlandi. Bu asos to'plami polarizatsiya funksiyalarini o'z ichiga olganligi sababli metall-donor o'zaro ta'sirlarni aniqlash uchun maqbuldir.

Geometriya optimallashtirish. Dastlab SMA-1 ioniti alohida holda optimallashtirildi. So'ngra Co^{2+} ioni amidoksim va guanidin guruhlarini yaqiniga joylashtirilib, butun kompleksning geometriyasi qayta optimallashtirildi. Optimallashtirishda gradient energiya mezoni 10^{-5} Hartree/Bohr darajasida qo'yildi. Bu natija strukturaning minimal energiyali konformatsiyasini olish imkonini berdi.

Elektron zichlik va orbital tahlil. Kompleksning elektron tuzilishini chuqurroq tahlil qilish uchun HOMO (highest occupied molecular orbital) va LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) energiya darajalari hisoblandi. Shuningdek, elektrostatik potensial (ESP) xaritalari tuzildi, bu donor atomlarning qaysi nuqtalarda metall ion bilan kuchliroq ta'sirlashishini ko'rsatadi. Elektron zichlikning taqsimlanishi orqali bog'lanish tabiatini tushuntirish imkoniyati yaratildi.

TAHLIL VA NATIJALAR

Polimer ionitlar ekologiya, kimyo va tibbiyot sohalarida keng qo'llaniladi. Ayniqsa, og'ir metall ionlarini adsorbsiyalash va selektiv ajratishda samarali natijalar beradigan amidoksim va guanidin guruhlariga ega polimerlar dolzarb ahamiyat kasb etmoqda. SMA-1 polimeri — akrilonitril, amidoksim, akrilamid va guanidin fragmentlaridan tashkil topgan kompleks tuzilmali sorbentdir. Ushbu ishda ushbu polimerning Co(II) ioni bilan bog'lanish xususiyatlari kvant-kimyoviy modelashtirish orqali o'rganiladi.

Modelashtirish GAMESS dasturi yordamida olib borildi. Hisob-kitoblar B3LYP funksional va 6-31G(d) asos to'plami yordamida bajarildi. Geometriya optimallashtirildi, molekulyar orbitallar, HOMO-LUMO energiya farqlari, elektron zichlik va elektrostatik potensiallar tahlil qilindi.

Asosiy bosqichlar :

- SMA-1 polimerining fragment modeli tuzildi;

- Co(II) ionining koordinatsion markaz sifatida qo'shilishi modellashtirildi;
- Geometriya optimallashtirilib, energetik parametrlar hisoblandi.

Optimallashtirilgan geometriya SMA-1 ning amidoksim va guanidin guruhlarini orqali Co(II) ionini bog'lashi mumkinligini ko'rsatdi. Koordinatsiya jarayonida bog'lanish energiyasi -55.6 kcal/mol atrofida bo'lib, bu mustahkam kompleks hosil bo'lishini bildiradi. Elektron zichlik taqsimoti va elektrostatik potentsial xaritalari ion-polimer o'zaro ta'sirlarining lokal xarakterini ko'rsatdi (1-jadval).

1- jadval.

GAMESS dasturi asosida SMA-1 polimer ionitining kobalt (II) ioni bilan o'zaro ta'siri kvant-kimyoviy modellashtirish natijalari

Parametr	Qiymat
Bog'lanish energiyasi	-55.6 kcal/mol
HOMO–LUMO farqi	3.84 eV
Koordinatsiya atomlari	O, N (amidoksim, guanidin)
Xelat halqalar soni	2

Kvant-kimyoviy modellashtirish natijalari SMA-1 polimer ionitining kobalt (II) ioni bilan kuchli kompleks hosil qiluvchi xususiyatga ega ekanligini ko'rsatdi. Ushbu natijalar SMA-1 ni og'ir metallarni ajratishda samarali sorbent sifatida ishlatish imkoniyatlarini tasdiqlaydi.

XULOSA VA TAKLIFLAR

Mazkur tadqiqotda SMA-1 polimer ionitining kobalt (II) ionlari bilan o'zaro ta'siri kvant-kimyoviy modellashtirish asosida o'rganildi. DFT usuli (B3LYP funksionali va 6-31G(d) asos to'plami) yordamida olib borilgan hisoblashlar natijasida polimer fragmentining Co^{2+} ioniga nisbatan yuqori affiniteti mavjudligi aniqlandi. Optimallashtirilgan geometriya natijalari SMA-1 polimerining amidoksim va guanidin guruhlarini orqali kobalt ionini samarali bog'lab, ikki xelat halqa hosil qilishini ko'rsatdi. Bu esa kompleksning yuqori barqarorligini ta'minlaydi.

Hisoblangan bog'lanish energiyasi -55.6 kcal/mol bo'lib, bu kuchli koordinatsion bog'lanish mavjudligini bildiradi. Shuningdek, HOMO–LUMO farqi 3.84 eV qiymatida chiqdi, bu kompleksning elektron jihatdan barqaror ekanligini tasdiqlaydi. Elektron zichlik taqsimoti va elektrostatik potentsial xaritalari donor atomlarning kobalt ioniga elektronlarni faol uzatishini ko'rsatdi. Bu natijalar SMA-1 polimerining sorbsiya jarayonida yuqori samaradorlik ko'rsatishini nazariy jihatdan asoslaydi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. G.X.Jumanazarova, R.A.Qodirova, T.R.Abduraxmonova SMA-1 polimer ioniti asosida og'ir metall ionlarini aniqlash va ajratish. "Kimyo sanoati va kimyoviy texnologiyaning muammolari va innovatsion yechimlari" mavzusidagi respublika ilmiy-amaliy anjumani. Navoiy. 23-24-may, 2025-yil. 79-81 bet

2. Р.А.Кодирова, Г.Х.Жуманазарова, Т.Р.Абдурахмонова . Определение ионов тяжелых металлов с помощью ионита, полученного на основе нитронного волокна Международная конференция по проблемам химии, ее применению в промышленности и зеленым технологиям.18-19 апреля 2025г. Наманган. 869-870 с

3. Шахидова Д.Н., Орзикулов Б.Т., Гафурова Д.А., Хайдарова С.Р., Мухамедиев М.Г. Полимерные сорбенты на основе полиакрилонитрила и полиэтиленполиамина // Матер. Респуб. научно прак. конф. «Современное состояние и перспективы развития коллоидной химии и нанохимии в Узбекистане» Ташкент, 24-25 ноября 2014 г. с. 73-74.

4. Schmidt, M. W., et al. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11), 1347–1363.

5. Kang, S. Y., et al. (2004). Adsorption of heavy metals using activated carbon prepared from peanut shell. *Journal of Environmental Science and Health*, 39(6), 1431–1444.

6. Wang, X., et al. (2011). Amidoxime-functionalized polymers for metal ion adsorption: A review. *Chemical Engineering Journal*, 210, 477–485.

7. Frenking, G., & Krapp, A. (2007). The nature of the bond in transition-metal complexes. *Journal of Computational Chemistry*, 28(1), 15–24.