

**POLIMERLAR KIMYOSI VA FIZIKASI INSTITUTI HUZURIDAGI  
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01  
RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**POLIMERLAR KIMYOSI VA FIZIKASI INSTITUTI**

**BURXANOVA NILUFAR JALOLITDINOVNA**

**XITUZAN HOSILALARINING ELEKTRON  
XARAKTERISTIKALARI VA REAKSION QOBILIYATLARI**

**01.04.06-Polimerlar fizikasi**

**FIZIKA — MATEMATIKA FANLARI BO‘YICHA FALSAFA  
DOKTORI (PhD) DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

**Toshkent-2023**

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa (PhD) doktori dissertatsiyasi  
avtoreferati mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)  
по физико-математическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on  
physical – mathematical sciences**

**Burxanova Nilufar Jalolitdinovna**

Xitozan hosilalarining elektron xarakteristikalari  
va reaksiya qobiliyatlari.....3

**Бурханова Нилуфар Жалолитдиновна**

Электронные характеристики и реакционные  
способности производных хитозана .....21

**Burkhanova Nilufar Jalolitdinovna**

Electronic characteristics and reactivity of  
chitosan derivatives .....39

**E'lon qilingan ishlar ro'yxati**

Список опубликованных работ  
List of published works .....43

**POLIMERLAR KIMYOSI VA FIZIKASI INSTITUTI HUZURIDAGI  
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01  
RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**POLIMERLAR KIMYOSI VA FIZIKASI INSTITUTI**

**BURXANOVA NILUFAR JALOLITDINOVNA**

**XITOZAN HOSILALARINING ELEKTRON  
XARAKTERISTIKALARI VA REAKSION QOBILIYATLARI**

**01.04.06-Polimerlar fizikasi**

**FIZIKA — MATEMATIKA FANLARI BO‘YICHA FALSAFA  
DOKTORI (PhD) DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

**Toshkent-2023**

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2023.2.PhD/FM891 raqam bilan ro'yxatga olingan.**

Dissertatsiya Polimerlar kimyosi va fizikasi institutida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume) Ilmiy kengash veb-sahifasida (polchemphys.uz) hamda «ZiyoNET» Axborot ta'lim portalida (www.ziynet.uz) joylashtirilgan.

**Ilmiy rahbar:** **Nurgaliyev Inar Nakipovich**  
fizika-matematika fanlari doktori, katta ilmiy xodim

**Rasmiy opponentlar:** **Potyomkin Igor Ivanovich**  
fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Abdurahmonov Umarbek**  
fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Yetakchi tashkilot:** **Namangan davlat universiteti**

Dissertatsiya himoyasi Polimerlar kimyosi va fizikasi instituti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi DSc02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 raqamli Ilmiy kengashning 2023 yil «\_\_\_» \_\_\_\_\_ soat «\_\_\_» dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 100128, Toshkent shahri, Abdulla Qodiriy ko'chasi, 7<sup>b</sup>. Tel: (+99871) 241-85-94; faks: (+99871) 241-26-61, e-mail: polymer@academy.uz).

Dissertatsiya bilan Polimerlar kimyosi va fizikasi institutining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (\_\_\_ raqami bilan ro'yxatga olingan). (Manzil: 100128, Toshkent shahri, Abdulla Qodiriy ko'chasi, 7<sup>b</sup>. Tel: (+99871) 241-85-94).

Dissertatsiya avtoreferati 2023-yil «\_\_\_» \_\_\_\_\_ kuni tarqatildi.  
(2023 yil «\_\_\_» \_\_\_\_\_ dagi \_\_\_ raqamli reestr bayonnomasi).

**S.Sh. Rashidova**  
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy  
kengash raisi, k.f.d., professor, akademik

**M.M. Usmanova**  
Ilmiy darajalar beruvchi  
Ilmiy kengash kotibi, k.f.n.,  
yetakchi ilmiy xodim

**S.S. Negmatov**  
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy  
kengash qoshidagi Ilmiy seminar  
raisi, t.f.d., professor, akademik

## KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

**Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati.** Dunyoda makromolekulalar tuzilishi, ularning nanozarrachalari va ular ishtirokidagi kimyoviy reaksiyalarning xossalarini o‘rganishda molekulyar modellashtirishdan foydalanishga alohida e‘tibor qaratilmoqda. Polisaxaridlarning reaksiyon qobiliyatlarini tadqiq qilishda chegara orbitalarining qo‘zg‘alish nazariyasi fundamental asoslarini qo‘llash va takomillashtirish, kimyoviy va biologik faollikda o‘zaro ta‘sir jarayonlarini ifodalash uchun elektron xarakteristikalar hamda strukturaviy omillar ta‘sirini o‘rganishda muhim ahamiyatga ega.

Bugungi kunda dunyoning yetakchi ilmiy markazlarida sintetik va tabiiy polimer tizimlarning elektron xarakteristikalarini va reaksiyon qobiliyatlarini oldindan belgilab berish va tahlil qilishda nazariy usullarni qo‘llash bo‘yicha qator ilmiy tadqiqotlar olib borilmoqda. Bunda turli xil sohalarda, xususan, tibbiyot va qishloq xo‘jaligida qo‘llaniluvchi polimer preparatlar olishda yangi tabiiy polisaxaridlar va ularning hosilalari asosida olingan polimer tizimlarni o‘rganish, xossalarini bashorat qilish, jumladan xitozanning modellarini yaratishda kompyuter kimyosi usullari imkoniyatlarini kengaytirish kabi ilmiy izlanishlarni olib borish muhim vazifalardan biri hisoblanadi.

Respublikamizda tabiiy polimerlar asosida yaratilgan nanostrukturaviy tizimlarni kompyuter modellashtirish usullarida tahlil va tadqiqot natijalarini asoslash bo‘yicha olib borilgan nazariy izlanishlarga alohida e‘tibor qaratilmoqda. Mamlakatimizni yanada rivojlantirish bo‘yicha Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasida<sup>1</sup> hamda 2030-yilgacha bo‘lgan ilm-fanni rivojlantirish konsepsiyasida<sup>2</sup> «...ma‘lumotlarni tahlil qilish hamda raqamli modellashtirish...», mamlakatimiz ilm-fanini rivojlantirish hamda fundamental tadqiqot natijalarini amaliyotga tadbiiq qilish vazifalari belgilab berilgan. Mazkur vazifalarni amalga oshirish uchun turli sohalarda qo‘llash imkonini beruvchi polimer tizimlar tuzilishining umumiy nazariyasini yaratish va polisaxaridlarni, jumladan, xitozan va uning hosilalarini o‘ziga xos xususiyatlarini namoyon qilish tabiatini ta‘riflash, turli xil funksional guruhlarga ega polimerlarning elektron xarakteristikalarini, polisaxaridlarning biologik faolligini namoyon qiluvchi modellarning reaksiyon qobiliyatlarini o‘rganishga yo‘naltirilgan ilmiy- amaliy tadqiqotlar muhim ahamiyat kasb etadi.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017 yil 7 fevraldagi PQ-4947-son “O‘zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo‘yicha harakatlar strategiyasi to‘g‘risida”, 2017 yil 17 fevraldagi PQ-2789-son «Fanlar akademiyasi faoliyati, ilmiy-tadqiqot ishlarini tashkil etish, boshqarish va moliyalashtirishni yanada takomillashtirish chora-tadbirlari to‘g‘risida»gi, 2021-yil 19-martdagi PQ-5032-son “Fizika sohasidagi ta‘lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi Qarorlari, shuningdek, mazkur faoliyatga tegishli boshqa

---

<sup>1</sup> O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi “2022-2026-yillarga mo‘ljallangan yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi PF-60-son farmoni.

<sup>2</sup> O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2020-yil 29-oktabrdagi “Ilm-fanni 2030-yilgacha rivojlantirish konsepsiyasini tasdiqlash to‘g‘risida”gi PF-6097-son farmoni.

me'yoriy huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishga ushbu dissertatsiya tadqiqoti muayyan darajada xizmat qiladi.

**Tadqiqotning Respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining asosiy ustuvor yo'nalishlariga mosligi.** Ushbu dissertatsiya ishi O'zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalarni rivojlantirishning VII. "Kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar" yo'nalishlariga muvofiq bajarilgan.

**Muommoning o'rganilganlik darajasi.** Dunyoning ko'pgina mamlakatlarida xitozan hosilalarini kompyuter modellashtirish va nazariy ma'lumotlarni eksperimental tadqiqotlarda tadqiq etishda xorijiy olimlar tomonidan faol izlanishlar olib borilmoqda. J. Zhao, Sh. Chen, J. Poater, M. Swart, J.M. Carnerero, A.G. Holzer, Sh.C. Glotzer, T.E. Gartner, A. Jayarama, W. Paul, A.R. Xoxlov, A.S. Kazachenko, I.I.Potemkin, J.H. Pacheco-Sánchez, N.L.D. Armendariz, M.N. Melo, F.M. Pereira, V.H. Carvalho-Silva, R.P. Gangadharan, S.S. Krishnan, B.Ch. Deka, D. Parthasarathi, M.S. Padusha, T. Pirawattana, T. Srinophakun, D. Villemin, M. Ibrahim, M. El-Sayed, A. Omar va boshqa olimlar kimyoviy faol funksional guruhlarni tavsiflash uchun reaksiyon qobiliyat deskriptorlarini hisoblashda olib borilgan izlanishlarda o'z hissasini qo'shishgan.

Respublikamizda mazkur yo'nalish rivojiga akademik Rashidova S.Sh. va uning shogirtlari, professorlar B.L. Oksengendler va N.N. Turayeva, fizika-matematika fanlar doktorlari B. Askarov va I.N. Nurgaliyev xitozan hosilalari va ular asosidagi nanotuzilmalarni tuzilishi va xususiyatlari haqida nazariy natijalari bilan o'z hissalarini qo'shishgan.

Ushbu izlanishlarga qadar molekulyar tizimlarning modellarini yaratish, ularning reaksiyon qobiliyatlarini o'rganish hamda polisaxaridlar va ularning hosilalari bilan bog'liq xususiyatlarni bashorat qilish muammolari yetarlicha o'rganilmagan. Ushbu yo'nalishda kvant mexanikasini qo'llashning taxminiy amaliy usullarini, murakkab atom tizimlarining asosiy xususiyatlarini juda murakkab hisob-kitoblarni jalb qilmasdan tushuntira oladigan usullarni ishlab chiqish maqsadga muvofiqdir.

**Tadqiqotning dissertatsiya bajarilgan ilmiy-tadqiqot muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi.** Dissertatsiya tadqiqoti O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Polimerlar kimyosi va fizikasi institutining OT-F7-01 "Nanopolimer tizimlar, maxsus xossalarga ega bo'lgan materiallarni yaratishda elektron xossalarni va kinetik jihatlarni o'rni" (2016-2020 yy), FZ-4721055613 "Yuqori molekulyar tizimlar asosida nanotolalarni shakllanishining fundamental jihatlari" (2022-2026 yy) loyihalari doirasida bajarilgan.

**Tadqiqot maqsadi** xitozanning turli birikmalar bilan o'zaro ta'sirini nazariy jihatdan o'rganish, uning hosilalari hosil bo'lishini, ularning reaksiyon qobiliyatlarini tavsiflash, shuningdek, eksperimental natijalarini nazariy jihatdan tasdiqlash.

**Tadqiqot vazifalari:**

xitozanning sulfatlovchi moddalar bilan reaksiyasini hamda reaksiya mahsuloti xitozanning sulfatlangan hosilalarini reaksiyon qobiliyatlarini o'rganish;

xitozan askorbatning nanozarrachalarini tuzilishini tavsiflash uchun xitozanni askorbin kislotasi hamda tripolifosfat bilan o'zaro ta'sirlashuvini o'rganish;

polimolekulyar komplekslarni hosil bo'lishida *Bombyx mori* ipak qurti g'umbagidan ajralib chiqqan oqsil tarkibiga kiruvchi aminokislotalar bilan xitozanni o'zaro ta'sirlashuvini o'rganish;

xitozanni kumush nanozarrachalari bilan o'zaro ta'sirlashuvini o'rganish, bimetal klasterlar (Ag/Cu) ning tuzilishi va elektron xarakteristikalarini o'rganish;

xitozan-karboksimetilsellyuloza polielektrolit komplekslarini hosil qilishda xitozanni dezatsetillash darajasini ta'sirini o'rganish;

xitozan/gidroksiapatit nanokompozitini olishda xitozan bilan gidroksiapatitni o'zaro ta'sirini o'rganish.

**Tadqiqotning obyekti** tabiiy polimerlar – xitozan, sulfat xitozan, xitozan askorbati, *Bombyx mori* oqsili bilan xitozanning polimolekulyar komplekslari, bimetal klasterlar, xitozan-karbokimetilsellyuloza kompleksi, xitozan-gidroksiapatit kompoziti.

**Tadqiqotning predmeti** xitozan hosilalari asosidagi polimer tizimlarining turli xarakteristikalarini hisoblash, geometrik va konfiguratsion tuzilishini va ularning reaksiyon qobiliyat bilan bog'liqligini o'rganishdan iborat.

**Tadqiqotning usullari.** Zichlik funksionali nazariyasi asosida Becke-3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) funksionali 6-31G(d,p), B3LYP/6-31++G(d,p), 3-21G, 3-21G\*\*, 6-31G\*\* bazaviy to'plamlaridan foydalangan holda DFT darajasida Gaussian 09, Gaussview 5.0.9 dasturi doirasida modellashtirish, hamda DS BIOVIA Materials Studio 2017 (17.1.0.48) ta'minot dasturining PCFF kuch maydonidan foydalangan holda molekulyar dinamik hisoblashlar.

**Tadqiqotning ilmiy yangiligi** quyidagilardan iborat:

ilk bor chegaraviy molekulyar orbitalarning hisoblangan raqamli qiymatlarini taqqoslanganda sulfat xitozan hosilalarini olishda xlorosulfon kislotasi xitozan bilan o'zaro ta'sirlashishda katta potensialga ega organik kislotalardan biri deb aniqlangan;

ilk bor xitozan-askorbat kislotasi-tripolifosfat o'zaro ta'sirlashuvini zichlik funksionali nazariyasi asosida o'rganilganda xitozan askorbat nanozarrachalarining modeli yaratilgan;

ilk bor zichlik funksionali nazariyasi asosida *Bombyx mori* oqsili tarkibiga kiruvchi aminokislotalarning xitozan bilan o'zaro ta'sir modeli yaratildi, kompleks barqarorligi va reaksiyon qobiliyat ko'rsatkichlari qiymatlari hisoblandi;

$Cu_3Ag_m$  ( $3 \leq m \leq 20$ ) tarkibining bimetal klasterlarini elektron xarakteristikalari hisoblangan, Ag atomi Cu atomi bilan interfeys hosil qilishda subklasterlarning segregatsiyalangan namunasini namoyon qila olishi, elektron tuzulishi bo'yicha eng maqbul klasterlar  $Cu_3Ag_{10}$ ,  $Cu_3Ag_{15}$  va  $Cu_3Ag_{20}$  ekanligi ko'rsatilgan;

karbokimetilsellyuloza (KMS) ning  $-NH_3^+$  va  $-COO^-$  guruhlar orasida o'zaro elektrostatik ta'sirlashish hisobiga xitozan KMS ning polielektrolit komplekslari hosil bo'lishi, hamda bu jarayonga pH aralashma va dezatsetillash darajasi ta'siri ko'rsatilgan;

ilk bor zichlik funksionali nazariyasi asosida xitozan pentomeri bilan gidroksiapatitning strukturaviy qismlari bilan o'zaro ta'sirlashuv modeli yaratildi, adsorbsiya energiyasi yuqori kattalikka ega, muvozanat masofasi esa 1,073 Å ni

tashkil etadi. Olingan natijalarning taqqoslanishi elektronni ko'chirish va ionlashish bo'lmaganda umumiy dipol momenti oshishini ko'rsatdi.

**Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:** Tadqiqot davomida olingan natijalar xitozanning yangi hosilalarini sintez qilish, ularning xususiyatlarini bashorat qilish va sintez jarayonida komponentlar o'rtasidagi o'zaro ta'sirni o'rnatish uchun ishlatilishi mumkin. Dissertatsiya ishida xitozan hosilalarining reaksiyon qobiliyati va xarakteristikalarini haqidagi ma'lumotlar ma'lumotnoma sifatida qo'llash imkonini beradi.

Xitozan va sulfatlovchi agentlarning reaksiyon qobiliyatini o'rganish natijalari xitozanning sulfat hosilalarini olishda xlorosulfon kislotasi eng maqbul sulfatlovchi qobiliyatini ko'rsatdi. Xitozan askorbat nanozarrachalari modeli tarkibi va tuzilishi haqidagi ma'lumotlar boshqa nanozarrachalarning hisoblash usullari yordamida tuzilishi va reaksiyon qobiliyatini aniqlashda, shuningdek, xitozan hosilalarining hali olinmagan nanozarrachalarini bashorat qilishda qo'llash mumkin.

Ushbu ishda olingan xitozanning Bombyx mori oqsili tarkibiga kiruvchi aminokislotalar bilan o'zaro ta'sirlashish modellari komplekslarning barqarorligini mavjudligini, turli biopolimerlarning o'zaro ta'sir mexanizmini o'rganish hamda funktsional guruhlarining reaksiyon qobiliyatini ko'rsatadi.

Bimetal klasterlarni o'rganish natijasida ma'lumotlar eng barqaror strukturalarni, shuningdek, ularni xitozan bilan barqarorlashtirish mexanizmini ko'rsatdi.

**Tadqiqot natijalarining ishonchligi.** Ilmiy ishda natijalar va hulosalarni asosligi molekulyar dinamika, kvant mexanikasi usullaridan foydalanilganligi bilan hamda yuqori natijaviy raqamli usullar va algoritmlar, kuzatishlar natijasidagi qo'lga kiritilgan eksperimental ma'lumotlar va boshqa olimlarning natijalari bilan olingan nazariy ma'lumotlarni mutanosibligini taqqoslash olib borilganligi bilan izohlanadi.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.** Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati dissertatsiyada olingan natijalar yordamida xitozan hosilalarining atom sathida elektron va strukturaviy xossalarni hamda reaksiyon qobiliyatlarini bashorat qilish imkonini beradi. Bundan tashqari yaratilgan xitozan hosilalari ta'sirlashuv modellari, xitozan Karboksimetilsellyulozaning polielektrolit komplekslarini hosil bo'lishida deatsetillash darajasining ta'siri, Bombyx mori oqsili tarkibiga kiruvchi aminokislotalarning xitozan bilan o'zaro ta'sirlashuv modeli shu kabi tizimlarni o'rganishda fundamental asos sifatida qo'llash imkoniyatini beradi.

Olingan natijalarning amaliy ahamiyati polimer tizimlarda jarayonlarini anglashda katta ahamiyatga ega. Xitozan hosilalarining reaksiyon qobiliyatlarini va biologik faolligini o'rganishda olingan natijalar mavjud nazariy va eksperimental ma'lumotlarni to'ldirishda xizmat qiladi. Elektron xarakteristikalarini ta'rifi bilan keltirilgan barcha modellar ilk marta yaratilgan bo'lib, keyinchalik boshqa tadqiqotchilar nafaqat ta'riflangan balki boshqa shu kabi tizimlarning tuzilishi va reaksiyon qobiliyatlari bashoratlarida hamda hisoblashlarida foydalanish imkoniyatini beradi.

**Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi.** "Xitozan hosilalarining elektron xarakteristikalarini va reaksiyon qobiliyatlarini" bo'yicha olingan natijalar asosida:

yaratilgan nazariy modellar, xususan xitozanning sulfatlovchi agentlar (xlorsulfon va sulfamin kislotalari) bilan reaksiyasini o'rganish hamda sulfatlangan xitozan hosilasi tadqiqotlari, askorbat xitozan nanozarrachalari modelini o'rnatish natijalari, Cu/Ag bimetall klasterlarining barqarorligi va shakllanishi tadqiqot natijalari BAA Sharja Amerika universitetining yagona tadqiqot markazi, FRG # FRG23-C-S56 tadqiqot loyihasida (BAA, American University of Sharjah 2023-yil 3-oktabrdagi xati) foydalanildi. Natijada tajribalarni o'zgartirish va xitozanning turli birikmalar bilan o'zaro ta'sirining yangi qoidalarini o'rnatish imkonini berdi;

kvant- nazariy hisoblashlar, hisoblangan xarakteristikalar va XZ monomeri bilan xlorsulfon kislotasining ta'sirlashuvi optimizatsiyalangan modeli, XZ ning sulfat hosilasi uchun reaksiyon qobiliyati hisoblangan deskriptorlaridan Fudan Universitetining loyihasi doirasida foydalanilgan (Xitoy, Fudan Universitetining 2023-yil 13-noyabrdagi xati). Natijada xitozanning O-sulfat hosilasining reaksiyon qobiliyatlarini tushuntirish imkonini berdi.

**Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi.** Dissertatsiya bo'yicha olingan asosiy ilmiy natijalari 15 ta xalqaro va 19 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma'ruza qilingan va muhokamadan o'tkazilgan.

**Tadqiqot natijalarining e'lon qilinishi.** Dissertatsiya mavzusi bo'yicha jami 41 ta ilmiy ishlar chop etilgan bo'lib, shulardan O'zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiyasi komissiyasining falsafa doktorlik (PhD) dissertatsiyalarining asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 7 ta maqola, jumladan, 2 tasi Scopus bazasiga kiruvchi jumallarda, 4 tasi respublika va 1 ta xorijiy jumallarda nashr etilgan.

**Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi.** Dissertatsiya tarkibi kirish, uchta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 110 bet.

## DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

**Kirish** qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati, tadqiqotning respublika fan va texnologiyalarini rivojlantirishning ustuvor yo'nalishlariga mos kelishi asoslangan. Mavzu bo'yicha chet eldagi ilmiy tadqiqotlar haqida qisqacha sharh va muammoning o'rganilganlik darajasi, ilmiy tadqiqotlarning maqsad, vazifalari, obykti va predmeti, natijalarning ilmiy yangiligi va amaliy ahamiyati bayon qilingan, tadqiqot natijalarining qo'llanilishi, dissertatsiya tuzilishi va nashr qilingan ilmiy ishlar to'g'risida ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning "**Reaksiyon qobiliyatning deskriptorlari**" nomli birinchi bobida bog'lanishlarning turli xarakteristikalarini hozirgi kunda keng qo'llanilayotgan hisoblash usullardan biri zichlik funksionali nazariyasi usuli tavsiflangan, bog'lanishlarning reaksiyon qobiliyatlari tavsifini beruvchi raqamli qiymatlarni va elektron tuzilishlar asosida hisoblanuvchi deskriptorlarning adabiyotlar tahlil qilingan. Dissertatsiya ishining ilmiy tadqiqot vazifalari asoslangan.

Dissertatsiyaning "**Hisoblash usullari va hisob kitob metodikasi**" nomli ikkinchi bobida dissertatsiyada foydalanilgan hisoblash usullari haqida

ma'lumotlar keltilgan. Dissertatsiya ishi Becke-3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) funksionalidan foydalangan holda 6-31G(d,p), bazaviy to'plami bilan B3LYP/6-31++G(d,p), 3-21G, 3-21G\*\*, 6-31G\*\* DFT darajasida nazariy hisoblashlar, shuningdek molekulyar dinamika hisoblashlari DS BIOVIA Materials Studio 2017 (17.1.0.48) ta'minot dasturining PCFF kuch maydonidan foydalangan holda nazariy hisoblashlar keltirilgan. Tadqiqot olib borilayotgan sistemalarning termodinamik xarakteristikalarini va reaksiyon qobiliyat deskriptorlarini hisoblash uchun formulalar keltirilgan.

Dissertatsiyaning “**Natijalar va ularning tahlili**” nomli uchinchi bobi xitozan hosilalarini reaksiyon qobiliyatlarini tadbiq etish uchun chegaraviy orbita g'alayonlanishi nazariyasi usulining fundamental asoslarini qo'llash va takomillashtirish, elektron xarakteristikalarini kvant-kimyoviy hisoblashlardan tashkil topgan natijalar va ularning tahlilidan iborat.

Xitozanning sulfatlanishi tarkibida bir nechta reaksiyaga qobiliyatli guruhlarining mavjudligi aralashgan hosilalarni olish imkonini beradi. Sulfatlovchi reagent va reaksiya sharoitiga bog'liq ravishda ularning munosabati turlicha bo'lishi mumkin, ya'ni N-sulfat XZ (N-SXZ), O-sulfat xitozan (O-SXZ), N,O-sulfat xitozan (N, O-SXZ) va -O,2-N,6-O- sulfat xitozan (O2-N6-O-SXZ) olishda. Mazkur ishning maqsadi sulfat xitozan hosil bo'lishi reaksiyasi va mahsulot reaksiyasining nazariy izlanishlaridan iborat bo'lgan. Ilmiy ishda GAUSSIAN09 dastur paketi DFT darajasining B3LYP/6-31++G(d,p) potensialidan foydalangan holda kvant-nazariy izlanishlar olib borilgan bo'lib, XZ monomerining xlorosulfon kislotasi (XSK) va sulfomin kislotasi (SK) bilan o'zaro ta'silashishi modeli optimizatsiya qilingan va xarakteristikalarini hisoblangan. 1-jadvalda sulfat hosilalari uchun reaksiyon qobiliyat deskriptorlarining qiymatlari hisob kitoblari keltirilgan.

### 1-jadval.

SXZ uchun B3LYP/6-31++G(d,p) bazaviy to'plamdan foydalanib hisoblangan elektron parametrlar.

Parametr (eV)	Qiymatlar			
	N-SXZ	O-SXZ	N-O-SXZ	O-N-O-SXZ
E <sub>YBMO</sub>	-10,32	-9,65	-11,64	-11,53
E <sub>QEMO</sub>	-0,52	0,014	-0,11	-0,81
Taqiqlangan zona kengligi (ΔE)	10,84	9,66	11,75	12,34
Kimyoviy potensial (μ)	-5,42	-4,82	-5,87	-6,17
Kimyoviy qattiqligi (η)	4,9	4,83	5,76	5,36
Yumshoqligi (ζ)	0,20	0,20	0,17	0,18
Elektrofillik indeksi (ω)	2,99	2,40	2,99	3,55
Zaryad ko'chirib o'tishning maksimal indeksi (ΔN <sub>max</sub> )	1,1	0,99	1,01	1,15
Elektromanfiylik (χ)	5,42	4,82	5,87	6,17
Elektronga aylanishi (EA)	0,52	-0,014	0,11	0,81
Ionlashish energiyasi (I)	10,32	9,65	11,64	11,53

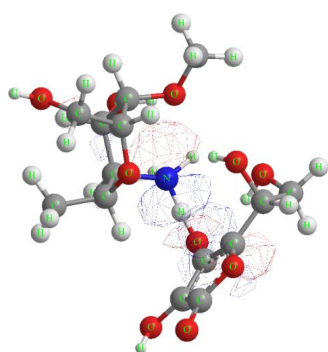
N–SXZ va N–O–SXZ (2,40 eV) hamda O–SXZ (2,40 eV) kuchli elektrofil hisoblanadi, O–N–O–SXZ (3,55 eV) esa juda kuchli elektrofil hisoblanadi, O–SXZ boshqa SXZ larga qaraganda ancha past kimyoviy bardoshlilikka ega, bu boshqa SXZ larga qaraganda O–SXZ ni reaksiyaga moyilligini bildiradi. 2-jadvalga muvofiq XZ molekulasiga kiritilayotgan har bir sulfat guruhlar electron energiyasini [E (RB3LYP)] 680 a.b ga pasaytiradi, SXZda sulfat guruhlarining sonini ortishi esa energiyani 333,946 dan 410,710 kkal/mol gacha chiziqli ortishiga olib keladi. Bitta sulfat sulfat guruhning kiritilishi issiqlik energiyasini o'rtacha 38 kkal/mol ga ortishiga sabab bo'ladi. Bir funksional guruh almashgan SXZ 334,538 kkal/mol, ikta funksional guruh almashgan SXZ 411,302 kkal/mol entalpiyaga ega. XZ molekulasida sulfat guruhlar sonining ortishi bilan entropiyasi ham ortishi kuzatildi.

**2-jadval.** 298,15 K va 1 atm da SXZ uchun hisoblangan issiqlik va electron energiya, entalpiya, entropiya, issiqlik sigimi va dipol momenti ( $\mu$ ).

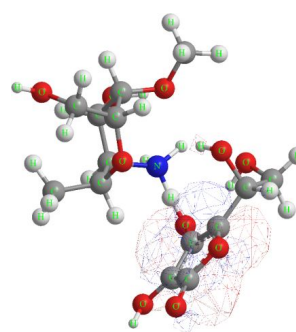
Parametr	Qiymati			
	N–SXZ	O–SXZ	N–O–SXZ	O–N–O–SXZ
E (RB3LYP) (a.b.)	-1865,727	-2549,611	-3228,845	-3986,761
$\mu$ (debay)	18.705	22.338	13,685	14,456
E (issiqlik) (kkal/mol)	334.469	372.680	410,710	458,210
Entalpiya (kkal/mol)	337,583	381,152	412.307	461,402
Entropiya (kal/mol K)	192.222	235,534	252,266	275.395
Issiqlik sig'imi (kal/mol K)	119,507	142.753	162,982	172.651

XZ ni sulfomin kislotasi (SK) va xlor sulfon kislotasi (XSK) kabi sulfatlovchi agentlardan foydalanib turli usullar bilan sulfatlanadi. Kvant tahlili orqali bog'lanishlarning kimyoviy barqarorligi va reaksiyon qobiliyatlarining tadqiqotlari ko'rsatilgan. Modellashtirish XZ bilan XSK va SK bilan o'zaro ta'sirlashuvini ko'rsatadi. Chegaraviy molekulyar orbitallarning hisoblangan ma'lumotlarini tahlil qilish asosida XSK katta potensialga ega bo'lgan organik kislotalardan biri sifatida aniqlangan.

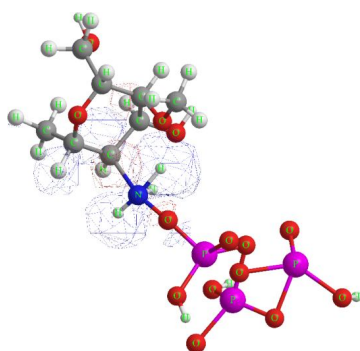
Ma'lumki askorbin kislotasi (AK) C-3 ( $pK_a = 4,2$ ) va C-2 ( $pK_a = 11,6$ ) da yenol gidroksillaridagi vodorod atomlarining harakatchanligi tufayli fermentative tizimlarda ham donor ham akseptor sifatida metabolizmida muhim rol o'ynaydi. Ushbu ishda xitozan askorbatining nanozarrachalarini hosil bo'lishida hamda adabiyotlardagi eksperimental natijalarni nazariy tasdiqi uchun asos bo'lib xizmat qiladigan tushunchalar DFT usulidan foydalanib XZ bilan AK va TPF ning o'zaro ta'sirlashuvi o'rganildi.



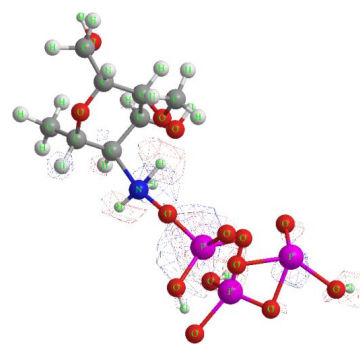
YBMO XZ-AK



QEMO XZ-AK



YBMO XZ-TPF



QEMO XZ-TPF

**1-rasm.** XZ-TPF va XZ-AK ning YBMO va QEMO uchun molekulyar orbita sirtlari.

1-rasmda optimizatsiyalangan XZ-AK va XZ-TPF strukturalari ko'rsatilgan. XZ aminoguruhleri bilan AK va TPF atomlarining kislorod atomi orasidagi masofa donor-akseptor ta'sirlashuvi uchun o'rinli bo'lgan diapazonda 1,52–1,98 Å joylashgan. Bu shundan darak beradiki, mahsulot XZ monomeri zvenosi bilan AK va TPF ta'sirlashuvi donor-akseptor mexanizmi bilan ushlab turiladi. XZ bilan AK ( $r = 1,60 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 171,10$ ) orasida o'zaro ta'sirlashuvi kuzatiladi, hamda XZ bilan TPF ( $r = 1,53 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 178,70$ ).

XZ va AK, TPF o'rtasidagi o'zaro ta'sirning kattaligini o'rganish maqsadida biz supermolekulyar yondashuv yordamida o'zaro ta'sir energiyasini baholadik. Dastlab biz o'zaro ta'sir energiyasini gazli fazada ( $\Delta E_{o'z.}$ ) keyin suvli fazani o'zaro ta'sir energiyasiga ta'sirini kuzatdik (3-jadval). Gazli fazada  $\Delta E_{o'z.}$  ni ko'tarilishi kuzatiladi va quyidagi tartibda bo'ladi: XZ-AK (-68,76 kkal/mol) > XZ-TPF (-64,58 kkal) donor-akseptor bog'lanish. Bu donor-akseptor bog'lanishning bog'lanish burchagi ikkita birikma orasidagi o'zaro ta'sir energiyasini aniqlaydigan yagona mezon emasligini ko'rsatadi. suvli fazaning kiritilishi gaz fazasiga nisbatan o'zaro ta'sir energiyalarining keskin pasayishiga olib keladi.  $\Delta E_{o'z.}$  si (NAXZ modeli bo'yicha) suvli fazada quyidagi tartibda joylashadi: XZ-AK (-13,67 kkal/mol) > XZ-TPF (-11,2 kkal/mol). Tanlab olingan XZ-AK va XZ-TPF solvatsiyasining erkin energiyasi ( $\Delta G_{sol}$ ) hisoblandi. Sinergetik effektda o'zaro ta'sirlashuv, XZ+nukleofil (AK,TPF)=NAXZ molekullararo donor-akseptor bog'lanishlariga NAXZ YBMOsi XZ yoki AK va TPF QEMOsi qaraganda pastroq energiyaga ega

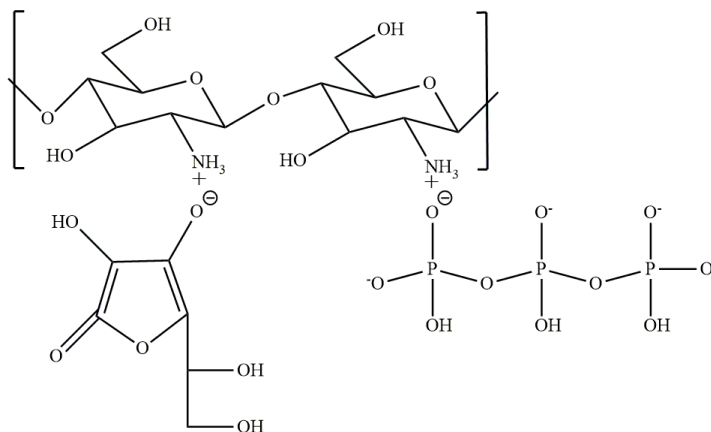
bo'lganda mos keladi. Shundan kelib chiqib energiya bo'linishini  $\Delta E_{gaz, suv} = (E_{YBMO (gaz, suv)}, NAXZ - E_{YBMO (gaz, suv)})$ , nukleofil (AK, TPF)) hisobladik.

2-rasmda hisob-kitob ma'lumotlari va adabiyotlardagi ma'lumotlarga tayanib NAXZ modelini ko'rsatdik.

### 3-jadval.

O'rganilayotgan tizimlarning hisoblangan parametrlari (kkal/mol).

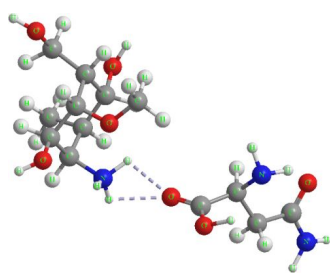
Tuzilishi	$\Delta E_{o'z}$ (BSSE)	$\Delta E_{o'z}$		$\Delta E_{o'z}$ (PCM modeli)	$\Delta G_{aralashma}$ (solvatatsiya modelidan foydalanib)	
XZ-AK	-68,76	-70,21		-13,67	-66,32	
XZ-TPF	-64,58	-66,32		-11,2	-62,45	
Tuzilishi	$\Delta E_{gaz}$	$\Delta E_{suv}$	$\Delta G_{gaz}$	$\Delta G_{suv}$	$\eta$ , gaz faza	$\eta$ , suv faza
XZ-AK	-72,42	-6,82	-40,34	-3,37	63,7	60,3
XZ-TPF	-51,49	-4,56	-41,35	-3,08	49,7	59,3



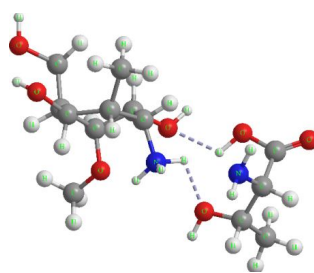
2-rasm. XZ-AK-TPF ta'sirlashuv mexanizmi.

NAXZ barqarorligini gaz va suvli fazalardagi umumiy energiya bilan kuzatish mumkin. Ikkala fazadagi umumiy energiyani solishtirish mumkin, ammo suvli fazadagi bir oz pastroq qiymatlar ularning suvli fazada kamroq barqaror ekanligini anglatadi. Ilk marta NAXZ modeli olingan. Hisoblash natijalari eksperimental tadqiqotlarda aniqlangan gaz fazasida xitozan va AK va TPF o'rtasida kuchli donor-akseptor o'zaro ta'siri mavjudligini aniqlaydi. Suvli fazaning kiritilishi o'zaro ta'sir energiyasining pasayishiga olib keldi.

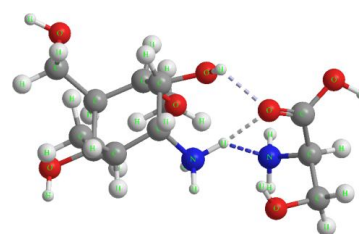
Oqsillarning anion va kationik polisaxaridlar bilan o'zaro ta'sirining fizik-kimyoviy hodisalari va qonuniyatlari katta amaliy qiziqish uyg'otadi. Ishning ushbu qismida Bombyx mori oqsili va xitozan asosida PMK preparatlarini ishlab chiqarishni nazariy o'rganish natijalari keltirilgan. Zichlik funksional nazariyasi (DFT) usuliga asoslanib, Bombyx mori ipak qurti g'umbaklaridan ajratilgan oqsil tarkibiga kiruvchi xitozan va AMK (asparagin, treonin, serin, glutamin, alanin, tirozin, histidin va lizin) o'rtasida komplekslar hosil bo'lishi aniqlangan. Ko'rib chiqilayotgan komplekslarning optimallashtirilgan tuzilishi 4- rasmda keltirilgan.



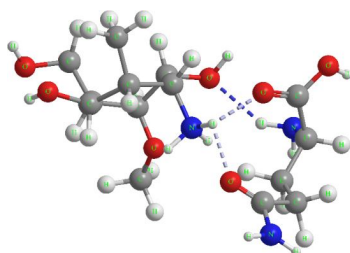
XZ-Asparagin



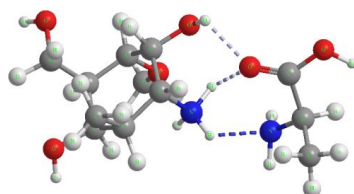
XZ-Treonin



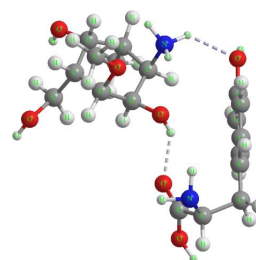
XZ-Serin



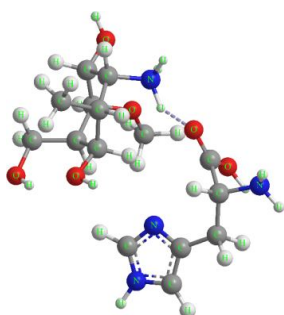
XZ-Glutamin



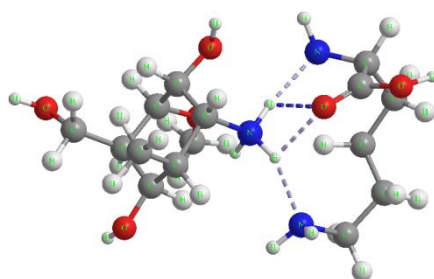
XZ-Alanin



XZ-Tirozin



XZ-Gistidin



XZ-Lizin

### 3-rasm. XZ bilan AMK ning optimizatsiyalangan geometriyasi

XZ ning amino- yoki -OH-guruhining H atomi va AMK guruhlarining O-COO- yoki -OH atomlari orasidagi masofa vodorod uchun xos bo'lgan 0,96-1,34 Å oralig'ida joylashgan. Bu xitozanning kompleks hosil bo'lishi jarayonida AMK bilan vodorod bog'larini hosil qilishini ko'rsatadi. XZ -Treonin va XZ -Gistidinning (0,96 Å) anomal ravishda qisqaroq masofani qayd etish muhimdir. 4- jadvaldan ko'rinib turibdiki, gistidinli kompleksdan tashqari (-11,45 kkal/mol),  $\Delta E_{o'z}$  ning hisoblangan qiymatlari barcha holatlarda salbiy bo'lib, bu -17,56 dan -129,46 kkal / mol oralig'ida komplekslarning shakllanishiga yordam beradi.

$\Delta E_{o'z}$  qiymati gaz fazasida 11,45 kkal/mol (XZ-lizin) dan -129,41 kkal/mol (C3-serin) va suvli fazada -11,03 kkal/mol (C3-lizin) dan -22,09 kkal/mol (XZ-asparagin) gacha o'zgarib turadi.  $\Delta E_{o'z}$  ning anomal darajadagi yuqori qiymatiga kelsak, bu vodorod migratsiyasiga olib keladigan katta kulon tortishish kuchi bilan bog'liq bo'lishi mumkin. O'zaro ta'sir kuchi quyidagi tartibda bo'ladi: XZ-asparagin > XZ-alanin > XZ-glutamin > XZ-serin > XZ-tirozin > XZ-treonin > XZ-lizin > XZ-histidin.

4-jadval.

XZ ni AMK komplekslari bilan BSSE bo'yicha to'g'rilangan o'zaro ta'sirlashuv energiyasi va vodorod bog'lar orasidagi masofa.

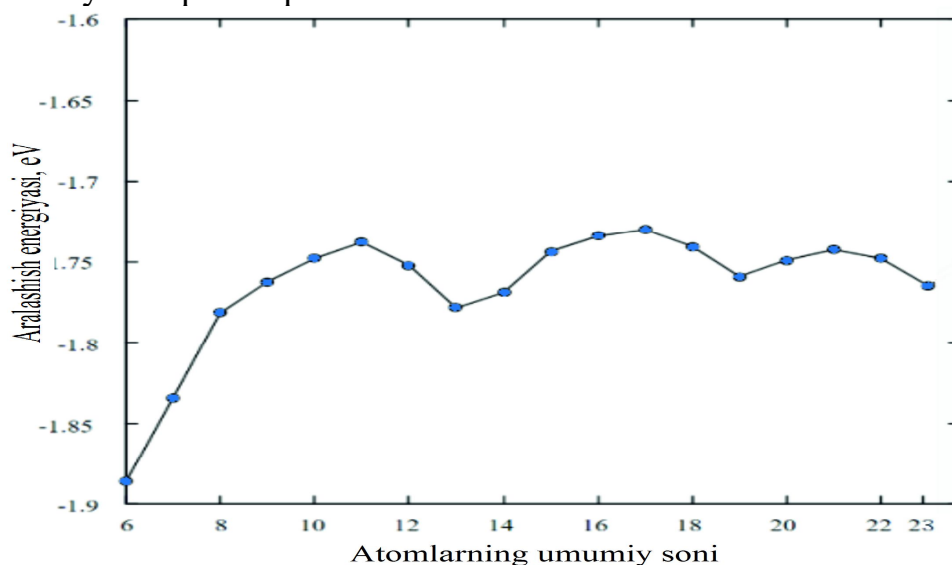
Tizim	Vodorod bog'lar, (suvli faza), Å	$\Delta E_{o'z}$ , kkal/mol (gazli faza)	$\Delta E_{o'z}$ , kkal/kal (suvli faza)
XZ-Asparagin	1,07	-110,81	-22,09
XZ-Treonin	0,96	-127,60	-15,54
XZ-Serin	1,07	-129,41	-16,83
XZ-Glyutomin	1,09	-80,56	-16,95
XZ-Alanin	1,026	-42,62	-19,65
XZ-Triozin	1,047	-18,38	-16,07
XZ-Gistodin	0,96	-11,45	-11,03
XZ-Lizin	1,046	-17,56	-21,14

Bundan tashqari, shuni ta'kidlash kerakki, asparagin bilan kompleks (ikki funksional guruh qarama-qarshi zaryadlangan)  $\Delta E_{o'z}$  qiymatlarida boshqa komplekslarga nisbatan sezilarli pasayish bor. Masalan,  $\Delta E_{o'z}$  qiymati suvdagi XZ-Serin kompleksi uchun suvli fazada -16,83 kkal/mol bo'lib, gaz fazasidagi qiymat bilan taxminan 112,58 kkal/mol farqni ko'rsatadi. XZ-tirozin holatida bu farq taxminan 2,31 kkal / mol ni, o'zaro ta'sir energiya qiymatlari esa -18,38 (gaz fazasi) va -16,07 (suv fazasi) tashkil qiladi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, qarama-qarshi zaryadli monomerlar haqiqatan ham suvdagi komplekslarga qaraganda ko'proq ajratilgan va barqarorroqdir, bu esa  $\Delta E_{o'z}$  ning pasayishiga olib keladi. Hisoblash ma'lumotlariga ko'ra, eng kichik diapazon oralig'i  $\Delta E$  (8,34 eV) xitozin-gistidin kompleksi va 9,28 eV xitozin-tirozin uchun kuzatiladi. Xitozin-tirozin va xitozin-gistidin komplekslarining elektron tuzilishiga ko'ra, gistidinning kimyoviy tuzilishining ta'siri, qo'sh bog'lar va ikkita azot atomi mavjud bo'lgan besh a'zoli halqaning mavjudligi va tirozin uchun olti- a'zoli halqa elektron strukturani sezilarli darajada o'zgartiradi.

Polisaxaridlar asosida bionanokompozitlar va metal nanozarrachalari multirezistent bakteriyalarga qarshi xususiyatlarga ega. Tadqiqotning birinchi qismida kumush (Ag) nanozarrachakari bilan XZning ta'sirlashuvi modellashtirish bajarildi. 6-(a,b)rasmda mos ravishda XZ va XZ-Ag ning suvli va gazli fazada optimizatsiyalangan geometriyasi keltirilgan. XZ turli xil ichkimolekulyar vodorod bog'lar bilan barqarorlangan, ya'ni O-H---O-H, O-H—halqasi va N-H-O-H. Vodorod bog'lar 2,285 Å dan 2,976 Å gacha tebranadi bitta uzaytirilgan bog'dan (2,976 Å) tashqari.

Keyinchalik, bimetalik nanozarralarni modellashtirish amalga oshirildi. Bimetalik  $Cu_3Ag_m$  klaster tuzilmalari 3 dan 20 gacha Ag atomlari qo'shilgan va asl yadro-qobiq strukturasi hosil qilgan o'zgarimas tarkibiga ega bo'lgan  $Cu_3$  bilan generatsiyalangan.  $Cu_3Ag_{10}$ ,  $Cu_3Ag_{16}$  va  $Cu_3Ag_{20}$  kompozitsiyalari maksimal barqarorlikni ko'rsatdi va eng barqaror monometalik klasterlar esa Ag ( $Ag_{13}$ ,  $Ag_{19}$  va  $Ag_{20}$ ) dir. Boshqa tomondan, monometalik Ag klasterlari, shuningdek, ularning nanozarralari juda barqaror tuzilmalar hisoblanadi, shuning uchun Ag atomlari ham bimetalik klasterlarning barqarorligini aniqlashi kutiladi. Tizimga qo'shilgan, manfiy bo'lib qolgan Ag soniga qarab, klasterlarning aralashish energiyasi orqali

bu effektni izohlash mumkin (4-rasm). Monometall Cu klasterlarining bog'lanish energiyasi monometalik Ag klasterlariga qaraganda yuqori bo'lib, bu bog'lanishlarning birinchi navbatda hosil bo'lishi va Ag-Cu bog'lari hosil bo'lgandan keyin saqlanib qolishi bilan izohlanadi.

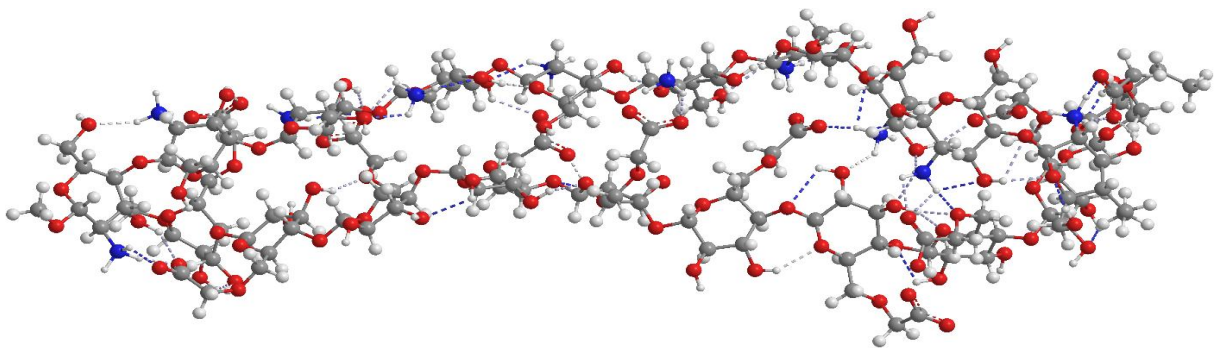


**4-rasm.**  $\text{Cu}_3\text{Ag}_m$  klasterining aralashish energiyasi

$\text{Cu}_3\text{Ag}_{11}$  klasteri  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$  tuzilishiga juda o'xshash kuboktaedr tuzilishga ega, ammo ikkinchisi kuboktaedrga qaraganda ikosaedrga yaqinroq geometriyaga ega. Shu sababli, bu klaster eng barqarorlardan biridir, chunki ikosaedral tuzilishda struktura bilan bog'liq sterik effektlar kichikdir. Eng barqaror klasterlar ( $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{15}$  va  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$ ) o'zlarini sof Ag kabi tutishga moyil. Deatsetillanish darajasi (DAD) va molekulyar og'irlik PEni tanlash uchun hal qiluvchi parametrdir. Kislotali pH XZ pKa dan past (6,4 dan past) bo'lgan muhitda kationik polielektrolit bo'lib, inson tanasi va atrof-muhit uchun toksik bo'lmagan, biologik mos va bioparchalanuvchidir. Ishning ushbu qismida biz xitozan tarkibidagi atsetamid va aminokislotalarning reaksiya qobiliyatini, xitozanning Na-KMS bilan o'zaro ta'sirini va ularning interpolimer komplekslarining barqarorligi o'rgandik.

Turli miqdorda asetamid va aminokislotalarni o'z ichiga olgan xitozan zanjirlarining KMS zanjiri bilan o'zaro ta'sirini o'rganish uchun hisob-kitoblar o'tkazildi. Hisoblashlar natijasi shuni ko'rsatdiki (5-rasm), XZ zanjirida atsetamid sonini ortishi bilan KMS bilan XZ o'rtasida sezilarli ta'sirlashuv ro'y bermaydi ya'ni neytral sharoitlarda polielektrolit komplekslar hosil bo'lmaydi. Hisoblashlar tuzilishida faqat protonlangan aminoguruh zanjirlaridan tashkil topgan XZ kompleksi uchun eng kam ta'sirlashuv energiyasi qiymati 8,9077 kJ/mol ekanligini ko'rsatdi. Kislotaning oshishi va xitozan zanjirida musbat zaryadlangan aminoguruhlar sonining ortishi PEKning hosil bo'lishi bilan o'zaro ta'sirlashuv sodir bo'ldi.

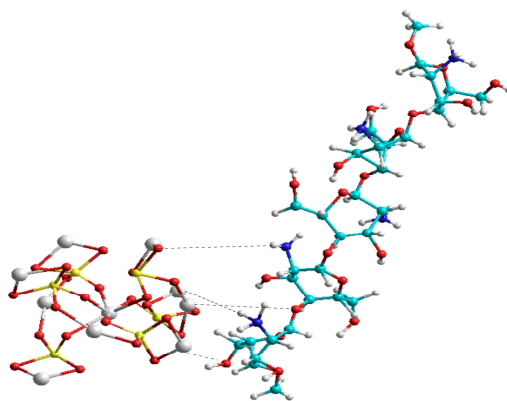
Molekulyar-dinamik modellashtirish yordamida aniqlangan polielektrolit kompleksi hosil bo'lish mexanizmi eksperimental ma'lumotlar bilan mos keladi ya'ni XZ-KMS KMS ning zaryadlangan  $-\text{NH}_3^+$  va  $-\text{COO}^-$  guruhlarning elektrostatik o'zaro ta'sirlashuvi hisobga hosil bo'ladi. Bu jarayonga pH-aralashma va xitozanning deatsetillanish darajasi ham ta'sir qiladi.



**5-rasm. Na-KMS ning 10 ta zvenosidan iborat faqat protonlangan aminoguruhlardan tashkil topgan 10 ta zvenoli xitozan zanjirining o‘zaro ta’sirlashuvi. O‘zaro ta’sir energiyasi = -2129 kkal/mol / -8,907736 kJ/mol.**

Xitozanga asoslangan nanokompozitlar, shu jumladan gidroksiapatit (GA) karkas qurilmalari uchun asosiy material sifatida va to‘qimalarni qayta tiklash samaradorligini oshirish uchun hozirda foydalanilayotgan biotibbiyot vositalarini o‘zgartirish quroli sifatida ishlatilishi mumkin. Nanokompozitlarning hosil bo‘lish mexanizmi biopolimer/GA tizimlaridagi o‘zaro ta’sirlarni bir qator maqolalarda o‘rganildi, ya’ni  $\text{Ca}^{2+}$  va  $\text{PO}_4^{3-}$  ionlari bilan biopolimerlarning GA ning tarkibiy qismlarini bilan o‘zaro ta’sirini ko‘rib chiqildi. XZ GA bilan o‘zaro ta’sirlashganda  $\text{Ca}^{2+}$  ionlari raqobatbardosh rol o‘ynaydi, kaltsiy ionlari GA kristallari yuzasida paydo bo‘ladi va elektrostatik bog‘lanishlar tufayli strukturani mustahkam ushlab turadi, ya’ni. X3  $-\text{NH}_2$  va  $\text{Ca}^{2+}$  ionlari GA o‘rtasida o‘zaro bog‘lanish hosil qiladi.

Ushbu qismda biz xitozan pentamerining GA tuzilishi bilan o‘zaro ta’sirini ularning o‘zaro ta’siri jarayonini yaxshiroq tushunish uchun ko‘rib chiqamiz. Ushbu tadqiqotning maqsadi GA va XZ o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirni ularning tabiatini tushunish uchun DFT usulida o‘rganishdan iboratdir. Eng barqaror struktura uchun adsorbsion energiya, zaryad o‘tkazish va muvozanat masofasi mos ravishda -1,44 eV, 1,073 Å va 0,246 e ni tashkil qiladi. Adsorbsion energiyaning yuqori qiymati xitozan yuzasida GA ning gemosorbtsiyasini ko‘rsatadi. Muvozanat masofasi (eng yaqin GA va xitozan atomi) GA/xitozan tizimida taxminan 2,053 Å ni tashkil qiladi. Optimallashtirishdan keyin xitozan yuzasida eng qulay GA tuzilishi 6-rasmda ko‘rsatilgan. GA strukturasi xitozan zanjiri yuzasiga perpendikulyar joylashgan. Biz quyidagi uchta o‘zaro ta’sirni kuzatdik: xitozanning protonlangan amino guruhining N atomi ( $-\text{NH}_3^+$ ) HA ning O atomi bilan o‘zaro ta’sir qiladi, xitozanning karboksil guruhining O atomi ( $-\text{OH}$ ) HA ning P atomi bilan o‘zaro ta’sir qiladi, xitozanning karboksil guruhining ( $-\text{OH}$ ) O atomi HA ning  $\text{Ca}^{2+}$  kationi bilan o‘zaro ta’sir qiladi. Adsorbsiya energiyasini va atomlar orasidagi muvozanat masofasini taqqoslash natijasida olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, xitozan protonlangan aminokislotalarning N atomi ( $-\text{NH}_3^+$ ) va HA ning O atomi o‘rtasidagi adsorbsiya energiyasi boshqa o‘zaro ta’sirlardan kattaroqdir, muvozanat masofa mos ravishda 1,073 Å tashkil qiladi.



**6-rasm.** Eng barqaror konfiguratsiyali XZ/GA kompozitining optimizatsiyalangan konfiguratsiyasi.

5-jadvalda taqiqlangan zona kengligi va hisoblangan termodinamik parametrlarning hisoblash natijalari keltirilgan. Taqiqlangan zona kengligi qiymatlari natijalari bo'yicha taqiqlangan zona kengligi pastroq o'zaro ta'sir qiymatiga ega bo'lgan hisob kitob ma'lumotlariga ega va termodinamik nuqtai nazardan barqarorroq hisoblanadi.

**5-jadval.**

300 K da XZ/GA o'zaro ta'sirlashuvida hosil bo'lish energiyasi, entalpiya, issiqlik sig'imi, erkin energiya va taqiqlangan zona kengligining hisob kitoblari.

Tizim	Hosil bo'lish issiqligi, kkal/mol	Entalpiya, kkal/mol	Erkin energiya, kkal/mol	Taqiqlangan zona, eV
GA/XZ	-491.93	19.445	-553.42	5.98
GA	-352.75	13.571	-389.426	6.83
XZ	-365.407	15.576	-415.588	9.49

6-jadval o'rganilayotgan o'zaro ta'sirlashuvni elektronlar sonini, zaryadlari va to'liq dipol momenti o'zgarish qiymatlari hisob kitoblari kiritilgan.

**6-jadval.**

XZ/GA o'zaro ta'sirlashuvning hisoblangan parametrlari (to'liq dipol momenti ( $\mu$  debay), va zaryadlari)

	XZ/GA	XZ
To'liq dipol momenti	8.789	2.745
N-atom (2)	-0.3052	-0.4126
O-atom (1)	-0.4713	-0.4421
O kislorod atomi bilan bog'lanish	-0.3265	-0.3948
H-atom (2)	0.3651	0.2684
Elektronlarsiz		
N-atom (2)	5.3128	5.3021
O-atom (1)	6.5221	6.4741
O kislorod atomi bilan bog'lanish	6.3485	6.4034
H-atom (2)	0.6354	0.7542

Hisoblash natijalari XZ 2-zvenosining kislorod atomi va azot atomi zaryadlari bo'laklab ortishini ko'rsatadi. XZ 2-zvenosi vodorod atomi bilan Ga kislorod atomi o'zaro ta'sirlashuvi vodorod atomining ortishiga olib keladi. Hisoblangan elektronlar soniga keladigan bo'lsak o'zaro ta'sirlashuvni hisobga olmagan holdagi XZ zvenosining ushbu atomlari bilan solishtirganda XZ 2-zvenosining O atomi bilan N atomlarining electron sonlari kamayishi sodir bo'ladi. Yuqorida keltirilgan natijalar o'zaro ta'sirlashuv jarayoni natijasida ionlashish jarayoni aksisiz elektronni ko'chirish mavjud emasligi ko'rsatadi. Dipol momenti yigindisi barcha sxemalar uchun ortadi. Hisoblangan dipol momenti qiymatining ortishi kompozit tuzilishi XZ bilan solishtirganda ancha reaksiyon moyil bo'lib qolganini aks etadi.

Shuningdek, bog'lanish tabiatini tushuntirish uchun kompozitning electron holat zichligi tahlil qilindi va hisoblandi. EHZ grafigida XZ zanjirining sirtida GA adsorbsiyasi Fermi sathi yaqinida ta'sir qiladi, va Fermi sathi yaqinida qoshimcha piklar ko'rinadi, bu XZ va GA o'rtasida gibridlanish kuzatilganidan dalolat beradi. Natijada, EHZ spektrlari adsorbsiyadan avval va keyin o'zgaradi, ularning energetik pog'onalari esa kimyoviy o'zaro ta'sirlashuv hisobiga aralashib ketadi. Shuningdek, adsorbsiya jarayonida GA va XZ o'rtasida zaryad ko'chirishda GA ning ( $E_f = -5,99 \text{ eV}$ ) va XZ/GA ( $E_f = -5,34 \text{ eV}$ ) Fermi sathi o'zgarishi sezilarli kuzatiladi.

Adsorbsiya energiyasi natijalari va GA uchun muvozanat masofa XZ zanjiri sirtida adsorbsiya energiyasi yuqori kattalikka egaligini ko'rsatadiki, GA ning muvozanat masofasi esa XZ zanjirida kamroq masofani ko'rsatadi. Adabiyotlardagi ma'lumotlardan hisoblash natijalaridan kelib chiqib XZ/GA nanozarrachalarining modeli ko'rsatildi.

## XULOSA

“Xitozan hosilalarining elektron xarakteristikalari va reaksiyon qobiliyatlari” mavzusidagi falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi bo'yicha olib borilgan tadqiqotlar natijasida quyidagi xulosalar taqdim etildi:

1. Sulfat xitozanni olishda kvant barqarorligi tahlili doirasida xlorsulfon kislotasining xitozan bilan o'zaro ta'sirlashuvda yuqori potensialga ega organik kislotalardan biri ekanligi aniqlandi hamda xitozanni sulfatlash reaksiyasi matematik modeli olindi.

2. Xitozan askorbatning nanozarrachalari modeli olindi, aynan suvli fazada xitozan-askorbin kislotasi ( $-6,82 \text{ kkal/mol}$ ), xitozan tripolifosfat ( $-4,56 \text{ kkal/mol}$ ) ta'sirlashuv energiyasi bilan protonni ko'chirish mavjudligi aniqlandi. xitozan nanoaskorbat hosil bo'lishi askorbin kislotaning enol guruhi bilan xitozanning aminokislotalar o'rtasida donor-akseptor bog'lanish hosil bo'lishi va xitozanning tripolifosfat bilan nisbiy koordinatsiyasi hisobiga ekanligi ko'rsatildi.

3. *Bombyx mori* oqsili tarkibi kiruvchi aminokislotalarning xitozan bilan o'zaro ta'sir modeli yaratildi, kompleks barqarorligi va reaksiyon qobiliyat ko'rsatkichlari qiymatlari hisoblandi, xitozan komplekslari bilan

aminokislotalarning barqarorligi ko'rsatilgan. Hisoblash natijalari kompleks hosil bo'lishida kuchli termodinamik kuchlar mavjudligini ko'rsatdi.

4. Ag ni xitozan bilan nanozarrachalarinig kompleks hosil qilishda va barqarorligiga xitozanning amino- hamda gidroksil guruhleri atomlari tufayli ekanligi ko'rsatildi.  $\text{Cu}_3\text{Ag}_m$  ( $3 \leq m \leq 20$ ) tarkibining bimetall klassterlari o'rganilgan, Cu atomi bilan interfeys hosil qilishda subklasterlarning segregatsiyalangan namunasini namoyon qila olishi ko'rsatilgan. Elektron strukturaga asosan eng maqbul klasterlar  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{15}$  va  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$  ekanligi aniqlandi.

5. KMS ning  $-\text{NH}_3^+$  va  $-\text{COO}^-$  guruhlar orasida o'zaro elektrostatik ta'sirlashish hisobiga xitozan KMSning polielektrolit komplekslari hosil bo'lishi, hisoblashlar zanjir tuzilishida faqat protonlangan aminogruppalar bo'lgan xitozan kompleksi uchun o'zaro ta'sirlashuv energiyasining eng kichik qiymati  $-8,907$  kJ/mol ekanligini ko'rsatdi, hamda bu jarayonga pH aralashma va deatsetillash darajasi ta'sir ko'rsatishi ko'rsatilgan.

6. Gidroksiapatit strukturasiining tarkibiy qismlari bilan xitozan pentomerining o'zarota'sirlashuv modeli olindi, xitozan zanjirining sirtidagi gidroksiapatit uchun adsorbsiya energiyasi va muvozanat masofasi bo'yicha natijalar adsorbsiya energiyasi katta qiymatga egaligini, muvozanat masofasi esa  $1,073 \text{ \AA}$  ekanligini ko'rsatadi. Olingan natijalarning taqqoslanishi elektronni ko'chirish va ionlashish bo'lmaganda umumiy dipol momenti oshishini ko'rsatdi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc. 02/30.12.2019.К/ФМ/Т.36.01 ПО  
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ХИМИИ  
И ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ**

---

**ИНСТИТУТ ХИМИИ И ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ**

**БУРХАНОВА НИЛУФАР ЖАЛОЛИТДИНОВНА**

**ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И РЕАКЦИОННЫЕ  
СПОСОБНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ ХИТОЗАНА**

**01.04.06 – Физика полимеров**

**АВТОРЕФЕРАТ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)  
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

**Ташкент-2023**

**Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2023.2.PhD/FM891**

Диссертация выполнена в Институте химии и физики полимеров.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекском, русском, английском (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (polchemphys.uz) и информационно-образовательном портале «ZiyoNET» (www.ziynet.uz).

**Научный руководитель:** **Нурғалиев Ильнар Накипович**  
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник

**Официальные оппоненты:** **Потемкин Игорь Иванович**  
доктор физико-математических наук, профессор  
**Абдурахмонов Умарбек**  
кандидат физико-математических наук, доктор физико-математических наук, профессор

**Ведущая организация:** **Наманганский государственный университет**

Защита диссертации состоится «\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 года в «\_\_\_\_\_» часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 при Институте химии и физики полимеров по адресу: 100128, г. Ташкент, ул. Абдулла Кадыри, 7<sup>б</sup>. Тел: (+99871) 241-85-94; факс: (+99871) 241-26-61, e-mail: polymer@academy.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института химии и физики полимеров Зарегистрирован \_\_ номером). (Адрес: 100128, город Ташкент, улица Абдулла Кадыри, 7<sup>б</sup>. Тел: (+99871) 241-85-94).

Автореферат диссертации разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2023года.

(протокол рассылки №\_\_ «\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 года).

**С.Ш. Рашидова**  
Председатель Научного совета  
по присуждению учёных степеней,  
д.х.н., профессор, академик.

**М.М. Усманова**  
Учёный секретарь Научного совета  
по присуждению учёных степеней,  
к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник

**С.С. Негматов**  
Председатель Научного семинара  
при Научном совете  
по присуждению учёных степеней,  
д.т.н., профессор, академик

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора (PhD) философии)**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В мире особое внимание уделяется использованию молекулярного моделирования как инструмент для изучения свойств макромолекул, структура их наночастиц и химических реакций с их участием. Развитие и применение фундаментальных основ метода теории возмущений граничных орбиталей для интерпретации реакционной способности полисахаридов, влияние структурных факторов, электронных характеристик для описания процессов взаимодействия, химической и биологической активности являются актуальной задачей.

В настоящее время в мире в ведущих научно-исследовательских центрах проводятся научные исследования по использованию теоретических методов для предсказания электронных характеристик и реакционных способностей синтетических и природных полимерных систем. Одной из важных задач в исследованиях является разработка моделей хитозана, в частности проведение теоретических исследований в области изучения новых производных, для получения препаратов для медицины и сельского хозяйства.

В нашей республике особое внимание уделяется теоретическим исследованиям, проводимым на основе анализа и результатов исследования наноструктурированных систем, созданных на основе природных полимеров, методами компьютерного моделирования. В Стратегии<sup>1</sup> действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан и Концепции<sup>2</sup> развития науки до 2030 года «...анализ данных и цифровое моделирование...», большое значение приобретают научно-практические исследования, направленные на изучение электронных характеристик полимеров содержащих различные функциональные группы, реакционной способности получение моделей проявления биологической активности полисахаридов, нахождение эффектов общей теории строения полимерных систем и прояснение природы проявления уникальных свойств производных полисахаридов, которые в дальнейшем найдут применение в сельском хозяйстве и медицинской практике.

Данное диссертационное направление служит выполнению задач, предусмотренных в Указах Президента Республики Узбекистана за № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 7 февраля 2017 года, №ПП-2789 от 17 февраля 2017 года «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, №ПП-5032 от 19-марта 2021-года “О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики” а также в других нормативно–правовых документах, принятых в данной сфере.

---

<sup>1</sup> Указ Президента Республики Узбекистан от 28-января 2022 г. № УП-60 «О стратегии развития нового Узбекистана на 2022 — 2026 годы»

<sup>2</sup> Указ Президента Республики Узбекистан, от 29 октября 2020 г. № УП-6097 «Об утверждении концепции развития науки до 2030 года»

**Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики.** Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий в Республике Узбекистан VII. «Химия, теоретические основы химической технологии, нанотехнологии».

**Степень изученности проблемы.** Во многих странах мира проводятся исследования в области компьютерного моделирования и теоретических интерпретаций экспериментальных исследований производных хитозана. В данном направлении исследования активно развиваются зарубежными учеными- J. Zhao, S. Chen, J. Poater, M. Swart, J.M. Carnerero, A.G.C. Holzer, S.C. Glotzer, T.E. Gartner, A. Jayarama, W. Paul, A.P. Хохлов, А.С. Казаченко, И.И. Потемкин, J.H. Pacheco-Sánchez, N.L.D. Armendariz, M.N. Melo, F. M. Pereira, V.H. Carvalho-Silva, R.P. Gangadharan, S.S. Krishnan, B.C. Deka, D. Parthasarathi, M.S.A. Padusha, T.Pirawattana, T. Srinophakun, D.Villemin, M.Ibrahim, M. El-Sayed, A.Omar и другими учеными, методами компьютерной химии рассчитаны дескрипторы реакционной способности для объяснения химически активных участков, функциональных групп.

В нашей республике в развитие этого направления внесли свой вклад академик С.Ш. Рашидова, профессора Б.Л.Оксенгендлер и Н.Н.Тураева, доктора физико-математических наук Б.Аскарлов и И.Н.Нурғалиев теоретическими результатами о структуре и свойствах производных хитозана и наноструктур на их основе.

До этих исследований проблемы создания моделей молекулярных систем, изучения их реакционных возможностей и прогнозирования свойств полисахаридов и их производных не были достаточно изучены. В этом направлении желательно развить приближенные практические методы применения квантовой механики, методы, которые могут объяснить главные особенности сложных атомных систем без привлечения слишком сложных расчетов.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научного учреждения, где выполнена диссертация.** Диссертация выполнена в рамках научных проектов Института химии и физики полимеров Академии наук Республики Узбекистан: OT-Ф7-01 «Нанополимерные системы, роль кинетических аспектов и электронного строения в создании материалов со специальными свойствами» (2016-2020 гг.), FZ-4721055613 «Фундаментальные аспекты формирования нановолокон на основе высокомолекулярных систем: условия, структурообразование, свойства» (2022-2026 гг.).

**Целью исследования** является теоретическое исследование взаимодействия хитозана с различными соединениями для описания формирования его производных, их реакционной способности, а также для теоретического подтверждения литературных экспериментальных результатов.

### **Задачи исследования:**

исследование реакции хитозана с сульфатирующими агентами и реакционной способности продуктов реакции - сульфатированных производных хитозана;

исследование взаимодействия хитозана с аскорбиновой кислотой и триполифосфатом для описания строения наночастицы аскорбата хитозана;

исследование взаимодействия хитозана с аминокислотами входящих в состав белка, выделенного из куколок тутового шелкопряда *Bombyx mori*, для образования полимолекулярных комплексов;

исследование взаимодействия хитозана с наночастицей серебра, изучение структуры и электронных характеристик биметаллических кластеров металлов (Ag/Cu);

исследование влияния степени дезацетилирования хитозана при образовании полиэлектролитных комплексов хитозан-карбоксиметилцеллюлоза;

исследование взаимодействия хитозана с гидроксиапатитом при получении нанокompозита хитозан/гидроксиапатит.

**Объект исследования** являются природные полимеры – хитозан, сульфат хитозана, аскорбат хитозана, полимолекулярные комплексы хитозана с белком *Bombyx mori*, биметаллические кластеры, комплексы хитозан-карбоксиметилцеллюлоза, композит хитозан/гидроксиапатит

**Предметом исследования** являются расчет различных характеристик, геометрического и конфигурационного строения полимерных систем на основе производных хитозана и их связь с реакционной способностью.

**Методы исследования.** Моделирование на основе теории функционала плотности с использованием функционала Becke-3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) с базисными наборами 6-31G(d,p), B3LYP/6-31++G(d,p), 3-21G, 3-21G\*\*, 6-31G\*\* уровня DFT в рамках программ Gaussian 09, Gaussview 5.0.9, а также расчеты молекулярной динамикой с использованием силового поля PCFF программного пакета DS BIOVIA Materials Studio 2017 (17.1.0.48).

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

впервые сравнением рассчитанных численных значений граничных молекулярных орбиталей показано, что хлорсульфоновая кислота была идентифицирована как одна из органических кислот с наибольшим потенциалом взаимодействия с хитозаном при получении сульфат производных;

впервые исследованием взаимодействия хитозан-аскорбиновая кислота-триполифосфат на основе теории функционала плотности получена модель наночастицы аскорбата хитозана;

впервые на основе теории функционала плотности получены модели взаимодействия хитозана с аминокислотами, входящими в состав белка *Bombyx mori*, рассчитанные значения показателей реакционной способности и стабильности комплексов;

рассчитаны электронные характеристики биметаллических кластеров состава  $Cu_3Ag_m$  ( $3 \leq m \leq 20$ ), показано, что они имеют тенденцию представлять сегрегированный образец субкластера, где атомы Ag образуют интерфейс с

атомами Cu, согласно электронной структуре наиболее устойчивые кластеры ( $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{15}$  и  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$ );

показано, что полиэлектролитные комплексы хитозан-КМЦ образуются за счет электростатического взаимодействия между заряженными группами - $\text{NH}_3^+$  и групп - $\text{COO}^-$  КМЦ, на данный процесс влияет как pH раствора, так и степень деацетилирования хитозана;

впервые на основе теории функционала плотности получена модель взаимодействия пентамера хитозана со структурной частью гидроксиапатита, энергия адсорбции имеет большую величину, а равновесное расстояние составляет 1,073 Å. Сопоставление полученных результатов показало, что при отсутствии переноса электронов и последующей ионизацией увеличивается общий дипольный момент системы.

**Практические результаты** исследования заключаются в следующем:

Полученные при проведении исследования результаты могут быть использованы для синтеза новых производных хитозана, прогнозу их характеристик и установлению взаимодействий между компонентами при их синтезе. Полученная в диссертационной работе количественная информация по реакционной способности и характеристикам производных хитозана представляет интерес как справочная.

Результаты исследования реакционной способности хитозана и сульфатирующих агентов показали лучшую сульфатирующую способность хлорсульфоновой кислоты при получении сульфат производных. Данные о составе и строении модели наночастицы аскорбата хитозана могут быть применены для установления расчетными методами строения и реакционной способности для других, а также прогноза для еще не полученных наночастиц производных хитозана.

Полученные в данной работе впервые модели взаимодействия хитозана с аминокислотами белка *Bombyx mori*, показали наличие устойчивости комплексов, механизме взаимодействий различных биополимеров. Данные по изучению биметаллических кластеров показали наиболее устойчивые структуры, а также механизм их стабилизации хитозаном.

**Достоверность результатов исследования.** Обоснованность научных положений и выводов подтверждаются тем, что в работе использовались методы квантовой механики, молекулярной динамики, а также высокоэффективные численные методы и алгоритмы, проводилась проверка соответствия полученных теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными наблюдений и результатами других ученых, а также тем, что выводы диссертационной работы хорошо согласуются с основными положениями теории физики полимеров, результаты обсуждены на республиканских и международных научных конференциях.

**Научная и практическая значимость исследования.**

Научная значимость полученных результатов определяется тем, что проведенные исследования позволили выявить на атомном уровне фундаментальные закономерности поведения электронных и структурных свойств производных хитозана, а также их реакционной способности.

Полученные данные имеют значение для понимания процессов в полимерных системах.

Практическая значимость исследования определяется тем, что полученные в работе результаты существенно дополняют и объясняют имеющиеся данные теоретических и экспериментальных работ по изучению биологической активности и реакционной способности производных хитозана. Все из представленных компьютерных моделей, с описанием их характеристик, построены впервые и могут быть использованы в дальнейшем другими исследователями для расчета и предсказания структуры и реакционной способности не только описанных, но и других подобных систем.

**Внедрение результатов диссертационной работы.** На основе полученных результатов по теоретическим исследованиям производных хитозана, их структуре и реакционной способности:

разработанные теоретические модели, в частности, результаты теоретического изучения реакции хитозана с сульфатирующими агентами (хлорсульфоновая и сульфаминовая кислоты) и исследование продуктов реакции - сульфатированных производных хитозана, результаты установления модели наночастицы аскорбата хитозана, формирования и стабилизации биметаллических кластеров Cu/Ag были использованы в исследовательском проекте FRG # FRG23-C-S56 Единого исследовательского центра Американского Университета Шарджи, ОАЭ American University of Sharjah (письмо 3-октября 2023 года из American University of Sharjah). В результате показано возможность модифицирование экспериментов и установить новые закономерности взаимодействия хитозана с различными соединениями;

квантово-теоретические расчеты, рассчитанные характеристики и оптимизированная модель взаимодействия мономерной формы хитозана с хлорсульфоновой кислотой, рассчитанные значения дескрипторов реакционной способности для сульфо-производных ХЗ были использованы в рамках проекте, поддерживаемых Фудань Университет (письмо 13-ноября 2023 года из Fudan University, China). В результате обоснована реакционная способность О-сульфат производного хитозана.

**Апробация результатов исследования.** Апробация результатов исследования. Результаты исследований апробированы на 15 международных и 19 республиканских конференциях.

**Опубликованность результатов исследования.** По теме диссертации опубликовано 41 научных работ, 7 статей, из них 2 статьи в журналах входящих в базу Scopus, 4 в республиканских и 1 в зарубежных журналах, рекомендуемых Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертации доктора философии (PhD).

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка цитируемой литературы. Объем диссертации составляет 110 страниц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность и востребованность темы диссертации, соответствие исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологии Узбекистана. Приведена короткая информация о проводимых научных исследованиях зарубежом и состояние изучения проблемы по теме, представлены цель и задачи, объекты и предмет исследования, изложена научная новизна и практическая значимость результатов, дана информация о применении результатов исследований, структуре диссертации и опубликованных работах.

В первой главе диссертации под названием **“Дескрипторы реакционной способности”** обсуждены литературные данные описаны так называемые дескрипторы, которые вычисляются на основании электронной структуры соединения и численные значения которых могут дать описание реакционной способности соединения, описан метод теории функционала плотности, который на данный момент является самым используемым методом расчета различных характеристик соединений. Обоснованы научно-исследовательские задачи диссертационной работы.

Во второй главе диссертации под названием **“Вычислительные методы и методика расчетов”** приводятся данные о вычислительных методах, использованных в диссертации. В диссертационной работе проведены теоретические расчеты с использованием функционала Becke-3-Lee-Yang-Parr (B3LYP) с базисными наборами 6-31G(d,p), B3LYP/6-31++G(d,p), 3-21G, 3-21G\*\*, 6-31G\*\* уровня DFT, а также расчеты молекулярной динамикой с использованием силового поля PCFF программного пакета DS BIOVIA Materials Studio 2017 (17.1.0.48). Приведены формулы для расчета дескрипторов реакционной способности и термодинамических характеристик исследованных систем.

В третьей главе диссертации под названием **“Результаты и их обсуждение”** состоит из результатов и их обсуждения, в которую входят квантово-химический расчет электронных характеристик, развитие и применение фундаментальных основ метода теории возмущений граничных орбиталей для интерпретации реакционной способности производных хитозана.

Сульфатирование ХЗ из-за наличия в структуре нескольких реакционноспособных групп неизбежно приводит к получению смешанных производных. В зависимости от сульфорирующего реагента и условий реакции их соотношение может варьироваться, т.е. получать N-сульфат ХЗ (N-CX<sub>3</sub>), O-сульфат хитозана (O-CX<sub>3</sub>), N,O-сульфат хитозана (N, O-CX<sub>3</sub>) и -O,2-N,6-O-сульфат хитозана (O2-N6-O-CX<sub>3</sub>). Целью данной части работы было теоретическое исследование реакции образования CX<sub>3</sub> и продуктов реакции. В данной работе проведены квантово-теоретические расчеты использованием потенциала B3LYP/6-31++G(d,p) уровня DFT пакетом программ GAUSSIAN09, рассчитаны характеристики и оптимизирована модель взаимодействия мономерной формы ХЗ с хлорсульфоновой кислотой (ХСК), сульфаминовой кислотой (СК). В табл 1 представлены рассчитанные

значения дескрипторов реакционной способности для сульфо-производных ХЗ.

**Таблица 1.**

Электронные параметры, рассчитанные с использованием базового набора B3LYP/6-31++G(d,p) для СХЗ.

Параметр (эВ)	Значения			
	N-CX3	O-CX3	N-O-CX3	O-N-O-CX3
Евзмо	-10,32	-9,65	-11,64	-11,53
Енвмо	-0,52	0,014	-0,11	-0,81
Ширина запрещенной зоны ( $\Delta E$ )	10,84	9,66	11,75	12,34
Химический потенциал ( $\mu$ )	-5,42	-4,82	-5,87	-6,17
Химическая твердость ( $\eta$ )	4,9	4,83	5,76	5,36
Мягкость ( $\zeta$ )	0,20	0,20	0,17	0,18
Индекс электрофильности ( $\omega$ )	2,99	2,40	2,99	3,55
Максимальный индекс переноса заряда ( $\Delta N_{max}$ )	1,1	0,99	1,01	1,15
Электроотрицательность ( $\chi$ )	5,42	4,82	5,87	6,17
Сродство к электрону (EA)	0,52	-0,014	0,11	0,81
Энергия ионизации (I)	10,32	9,65	11,64	11,53

N-CX3 и N-O-CX3 (2,40 эВ) и O-CX3 (2,40 эВ) являются сильными электрофилами, а O-N-O-CX3 (3,55 эВ) является очень сильным электрофилом, O-CX3 имеет более низкую химическую стойкость, чем другие СХЗ, что означает, что O-CX3 более реакционноспособен, чем другие СХЗ. Согласно данным, приведенным в табл. 2, введение каждой сульфатной группы в молекулу ХЗ снижает электронную энергию [E (RB3LYP)] на 680 а.е. энергия линейно возрастает от 333,946 до 410,710 ккал/моль с увеличением количества сульфатных групп в СХЗ; введение одной сульфатной группы приводит к увеличению тепловой энергии в среднем на 38 ккал/моль. Так, однозамещенный СХЗ имеет энтальпию 334,538 ккал/моль, а трехзамещенный СХЗ — энтальпию 411,302 ккал/моль. Было замечено, что энтропия увеличивается с увеличением числа сульфатных групп в молекуле ХЗ.

**Таблица 2.**

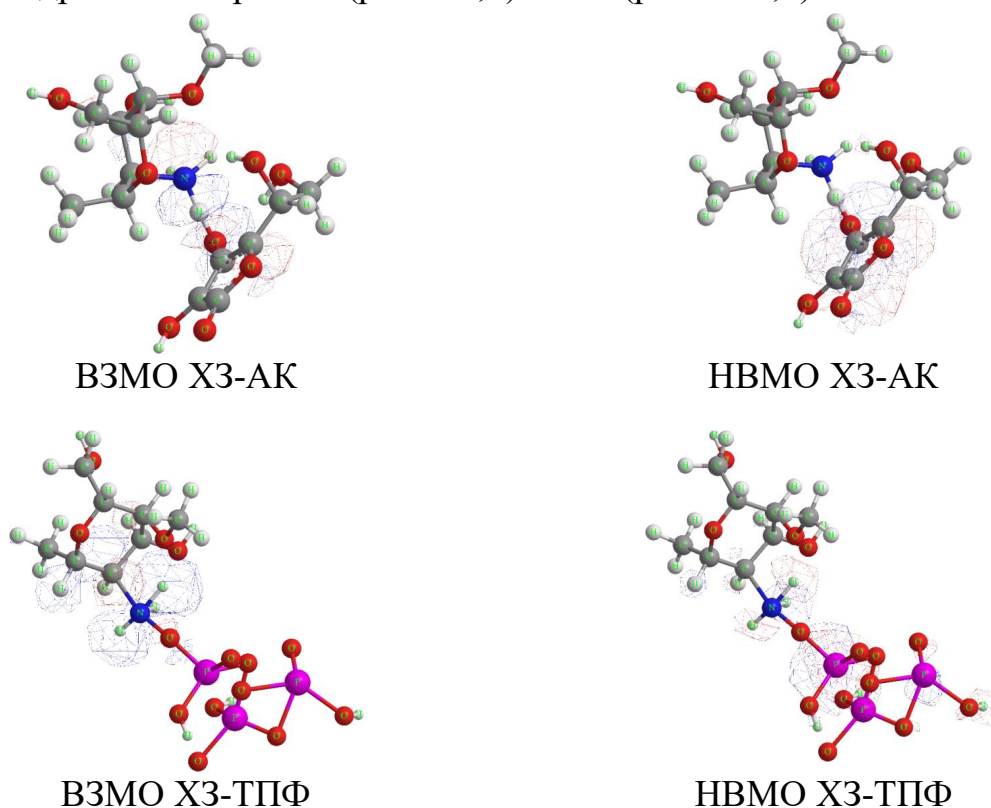
Расчетные тепловая и электронная энергии, энтальпия, энтропия, теплоемкость и дипольный момент ( $\mu$ ) для СХЗ (1–4) при 298,15 К и 1 атм.

Параметр	Значения			
	N-CX3	O-CX3	N-O-CX3	O-N-O-CX3
E (RB3LYP) (а.е.)	-1865,727	-2549,611	-3228,845	-3986,761
$\mu$ (Дебай)	18,705	22,338	13,685	14,456
E (тепловая) (ккал/моль)	334,469	372,680	410,710	458,210

Энтальпия (ккал/моль)	337,583	381,152	412,307	461,402
Энтропия (кал/моль К)	192,222	235,534	252,266	275,395
Теплоемкость (кал/моль К)	119,507	142,753	162,982	172,651

ХЗ сульфатируют различными методами и с использованием сульфатирующих агентов, таких как хлорсульфоновая (ХСК) и сульфаминовая (СК) кислоты. На основе анализа рассчитанных данных граничных молекулярных орбиталей показано, что ХСК была идентифицирована как одна из органических кислот с наибольшим потенциалом взаимодействия в рамках анализа квантовой стабильности.

Известно, что аскорбиновая кислота (АК) играет важную роль в метаболизме, выступая как акцептором, так и донором протонов в ферментативных системах, благодаря подвижности атомов водорода в енольных гидроксилах при С-3 ( $pK_a = 4,2$ ) и С-2 ( $pK_a = 11,6$ ).



**Рисунок 1.** Молекулярные орбитальные поверхности для ВЗМО и НВМО ХЗ-АК и ХЗ-ТПФ.

В данной части работы исследовалось взаимодействие ХЗ с АК и триполифосфатом (ТПФ) с использованием метода DFT, чтобы послужить основой для понимания формирования наночастиц аскорбата хитозана (НАХЗ), а также для теоретического подтверждения литературных экспериментальных результатов.

Оптимизированные структуры ХЗ-АК и ХЗ-ТПФ показаны на рис. 1. Расстояние между атомом водорода аминогруппы ХЗ и атомом кислорода атомов АК и ТФП находится в диапазоне 1,52–1,98 Å, что характерно для донорно-акцепторного взаимодействия и таким образом устанавливает тот факт, что продукт взаимодействия одного мономерного звена ХЗ с АК и ТПФ удерживается вместе донорно-акцепторным механизмом. Связь образуется

при взаимодействии ХЗ с АК ( $r = 1,60 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 171,10$ ), а также ХЗ с ТПФ ( $r = 1,53 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 178,70$ ).

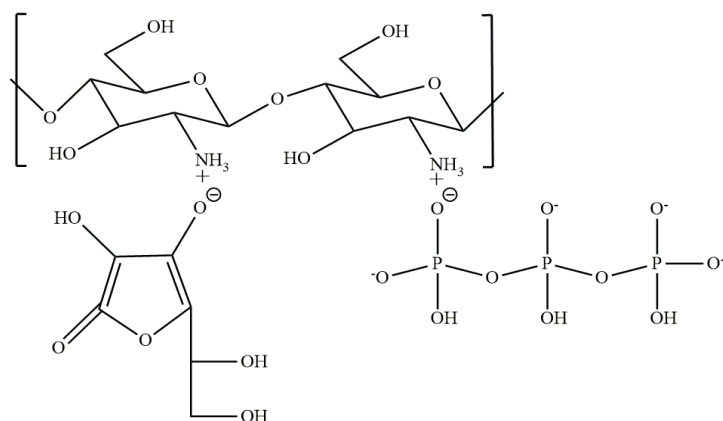
С целью изучения величины взаимодействия между ХЗ и АК, ТПФ, мы оценили энергию взаимодействия, используя супермолекулярный подход. Сначала мы рассчитали энергии взаимодействия ( $\Delta E_{\text{взаим.}}$ ) в газовой фазе, а затем наблюдали влияние водной фазы на энергию взаимодействия (табл. 3). В газовой фазе наблюдаются довольно высокие значения  $\Delta E_{\text{взаим}}$  и имеют следующий порядок: ХЗ-АК (-68,76 ккал/моль) > ХЗ-ТПФ (-64,58 ккал) донорно-акцепторная связь. Это указывает на то, что валентный угол донорно-акцепторной связи не является единственным критерием, определяющим энергию взаимодействия между двумя соединениями. введение водной фазы приводит к резкому падению энергий взаимодействия по сравнению с газовой фазой.  $\Delta E_{\text{взаим.}}$  (по модели НАХЗ) в водной фазе располагаются в порядке: ХЗ-АК (-13,67 ккал/моль) > ХЗ-ТПФ (-11,2 ккал/моль). Далее мы рассчитали свободную энергию сольватации ( $\Delta G_{\text{sol}}$ ) (используя модель сольватации SMD) выбранных ХЗ-АК и ХЗ-ТПФ. В синергетическом эффекте взаимодействий типа, межмолекулярных **ХЗ + нуклеофил(АК, ТПФ) = НАХЗ благоприятствует** донорно-акцепторные взаимодействия, когда ВЗМО НАХЗ имеет более низкую энергию, чем ВЗМО ХЗ или НВМО АК и ТПФ. Таким образом, мы рассчитали энергетическое разделение  $\Delta E_{\text{газ, водн.}} = (E_{\text{ВЗМО (газ, водн.)}} - E_{\text{ВЗМО (газ, водн.)}} - E_{\text{ВЗМО (газ, водн.)}})$ , нуклеофил (АК, ТПФ)). Формирование донорно-акцепторных взаимодействий подтверждается, исходя из данных об энергии ВЗМО и НВМО.

В соответствии с литературными данными и данными результатов расчетов нами предложена модель НАХЗ, представленная на рис. 2.

**Таблица 3.**

Расчетные параметры (в ккал/моль) исследуемых систем

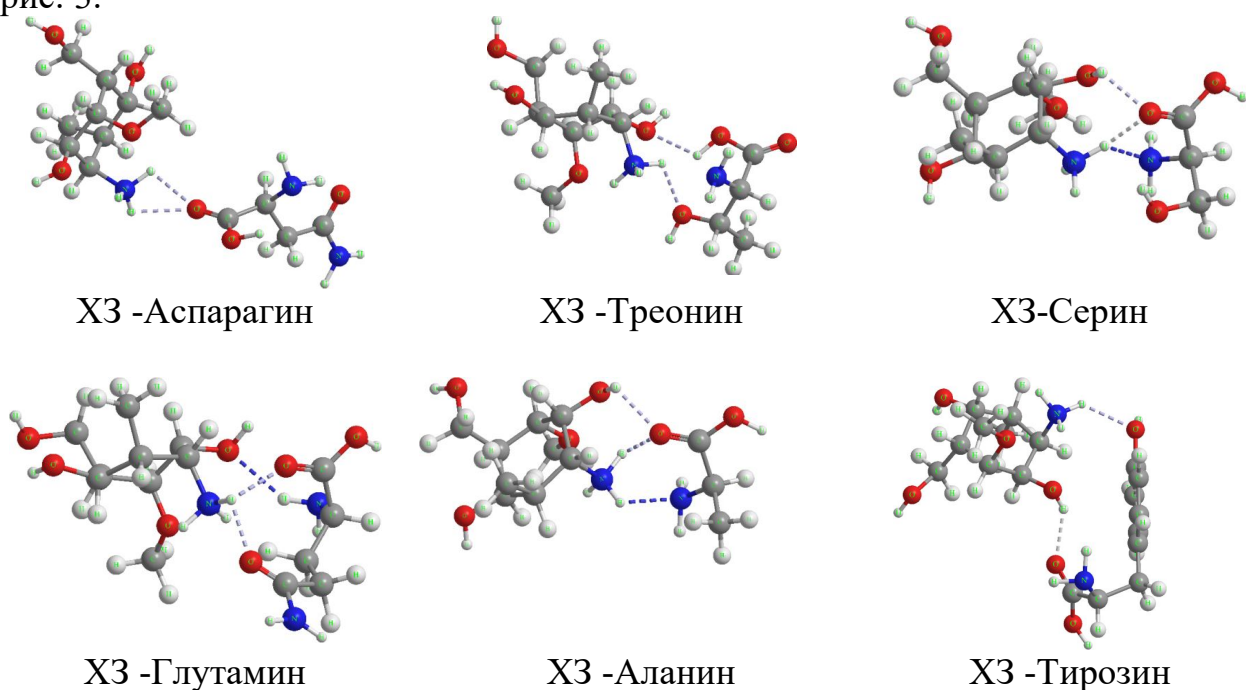
Структура	$\Delta E_{\text{взаим.}}$ (BSSE коррек)	$\Delta E_{\text{взаим}}$		$\Delta E_{\text{взаим}}$ (модель PCM)	$\Delta G_{\text{раств}}$ (SMD модель)	
ХЗ-АК	-68,76	-70,21		-13,67	-66,32	
ХЗ-ТПФ	-64,58	-66,32		-11,2	-62,45	
Структура	$\Delta E_{\text{газ}}$	$\Delta E_{\text{вод}}$	$\Delta G_{\text{газ}}$	$\Delta G_{\text{вод}}$	$\eta$ , газовая фаза	$\eta$ , водная фаза
ХЗ-АК	-72,42	-6,82	-40,34	-3,37	63,7	60,3
ХЗ-ТПФ	-51,49	-4,56	-41,35	-3,08	49,7	59,3

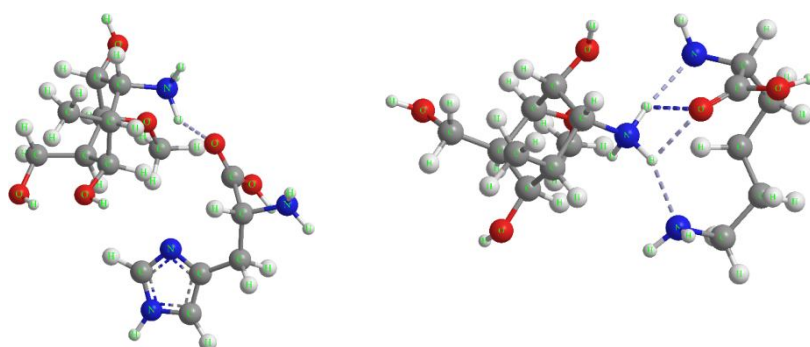


**Рисунок 2.** Механизм взаимодействия ХЗ-АК-ТПФ

Стабильность НАХЗ можно контролировать по общей энергии как в газовой, так и в водной фазах. Общая энергия в обеих фазах сопоставима, но несколько более низкие значения в водной фазе означают, что они менее стабильны в водной фазе. Впервые получена модель НАХЗ. Результаты расчетов устанавливают существование сильных донорно-акцепторных взаимодействий между ХЗ и АК и ТПФ в газовой фазе, обнаруженными в экспериментальных работах. Введение водной фазы приводило к падению энергии взаимодействия.

Большой практический интерес представляют физико-химические явления и закономерности взаимодействия белков с анионными и катионными полисахаридами. В данной части работы представлены результаты теоретического изучения получения препаратов ПМК на основе белка *Bombyx mori* и ХЗ. На основе метода теории функционала плотности (DFT) выявлено образование комплексов между ХЗ и АКМ (аспарагин, треонин, серин, глутамин, аланин, тирозин, гистидин и лизин), входящих в состав белка, выделенного из куколок тутового шелкопряда *Bombyx mori*. Оптимизированная структура рассматриваемых комплексов представлена на рис. 3.





ХЗ -Гистидин

ХЗ –Лизин

**Рисунок 3.** Оптимизированная геометрия комплексов ХЗ с АМК

Согласно табл. 4, расстояние между атомом Н amino- или -ОН-группы ХЗ и атомом О -COO<sup>-</sup> или -ОН групп АМК находится в диапазоне 0,96–1,34 Å, что характерно для водородных связей. Это указывает на то, что ХЗ образует водородные связи с АМК при образовании комплексов. Важно отметить аномально более короткое расстояние ХЗ-Треонин и ХЗ-Гистидин (0,96 Å).

**Таблица 4.**

Расстояние водородной связи и скорректированная по BSSE энергия взаимодействия ХЗ с комплексами АМК

Система	Водородная связь, (водная фаза), Å	$\Delta E_{\text{взаим.}}$ , ккал/моль (газовая фаза)	$\Delta E_{\text{взаим.}}$ , ккал/моль (Водная фаза)
ХЗ-Аспарагин	1,07	-110,81	-22,09
ХЗ- Треонин	0,96	-127,60	-15,54
ХЗ-Серин	1,07	-129,41	-16,83
ХЗ-Глютамин	1,09	-80,56	-16,95
ХЗ-Аланин	1,026	-42,62	-19,65
ХЗ-Тирозин	1,047	-18,38	-16,07
ХЗ-Гистидин	0,96	-11,45	-11,03
ХЗ-Лизин	1,046	-17,56	-21,14

Величина  $\Delta E_{\text{взаим.}}$  колеблется от 11,45 ккал/моль (ХЗ-лизин) до -129,41 ккал/моль (ХЗ-серин) в газовой фазе и от -11,03 ккал/моль (ХЗ-лизин) до -22,09 ккал/моль (ХЗ-аспарагин). Что же касается аномально высокого значения  $\Delta E_{\text{взаим.}}$ , то это может быть связано с большой кулоновской силой притяжения, приводящей к миграции водорода. Сила взаимодействия располагается в следующем порядке: ХЗ-Аспарагин>ХЗ-Аланин>ХЗ-Глутамин>ХЗ-Серин>ХЗ-Тирозин>ХЗ-Треонин>ХЗ-Лизин>ХЗ-Гистидин.

Кроме того, стоит отметить, что комплекс с аспарагином (в котором две функциональные группы заряжены противоположно) имеют значительное снижение значений  $\Delta E_{\text{взаим.}}$  по сравнению с другими комплексами. Например, значение  $\Delta E_{\text{взаим.}}$  для комплекса ХЗ-Серин в воде составляет -16,83 ккал/моль в водной фазе, что указывает на разницу примерно в 112,58 ккал/моль со значением в газовой фазе. В случае ХЗ-Тирозина эта разница составляет около 2,31 ккал/моль, соответственно

значения энергии взаимодействия составляют -18,38 (газовая фаза) и -16,07 (водная фаза). Результаты показывают, что мономеры с противоположными зарядами действительно более разделены и более стабильны, чем комплексы в воде, что приводит к уменьшению  $\Delta E_{\text{взаим}}$ . Согласно данным расчета, наименьшая ширина запрещенной зоны  $\Delta E$  (8,34 эВ) наблюдается для комплекса X3-Гистидин и 9,28 эВ для X3-тирозин. Согласно электронному строению комплексов X3-тирозин и X3-гистидин, очевидно влияние химической структуры гистидина, наличие пятичленного цикла с наличием двойных связей и двух атомов азота, и для тирозина шестичленного цикла сильно изменяют электронное строение.

Бионаноконпозиты на основе полисахаридов и наночастиц металлов (БНК) имеют свойства против мультирезистентных бактерий. В первой части исследования проведено моделирование взаимодействия X3 с наночастицами серебра (Ag). Были получены оптимизированные геометрии в газовой и водной фазах X3 и X3-Ag соответственно. Звено X3 стабилизировано различными типами внутримолекулярных водородных связей, а именно O-H--O-H, O-H--кольцо и N-H-O-H. Длина связи H-связей колеблется от 2,285 Å до 2,976 Å с одной исключительно удлиненной связью N—H—O—H (2,976 Å).

Далее проводили моделирование биметаллических НЧ. Структуры биметаллических кластеров  $\text{Cu}_3\text{Ag}_m$  были сгенерированы через плоскую структуру с фиксированной композицией  $\text{Cu}_3$ , в которую было добавлено от 3 до 20 атомов Ag с образованием изначальной структуры ядра-оболочки. Максимальную устойчивость показали составы  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{16}$  и  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$ , а наиболее стабильные монометаллические кластеры Ag ( $\text{Ag}_{13}$ ,  $\text{Ag}_{19}$  и  $\text{Ag}_{20}$ ). С другой стороны, монометаллические кластеры Ag, а также их наночастицы являются высокостабильными структурами, поэтому ожидается, что атомы Ag также будут определять устойчивость биметаллических кластеров. Этот эффект можно объяснить энергией смешения кластеров, которые остались отрицательными в зависимости от количества Ag, добавленного в систему (рис. 4). Энергия связи монометаллических кластеров Cu больше, чем для монометаллических кластеров Ag, что предполагается тем, что эти связи образуются первыми и сохраняются после образования связей Ag-Cu.

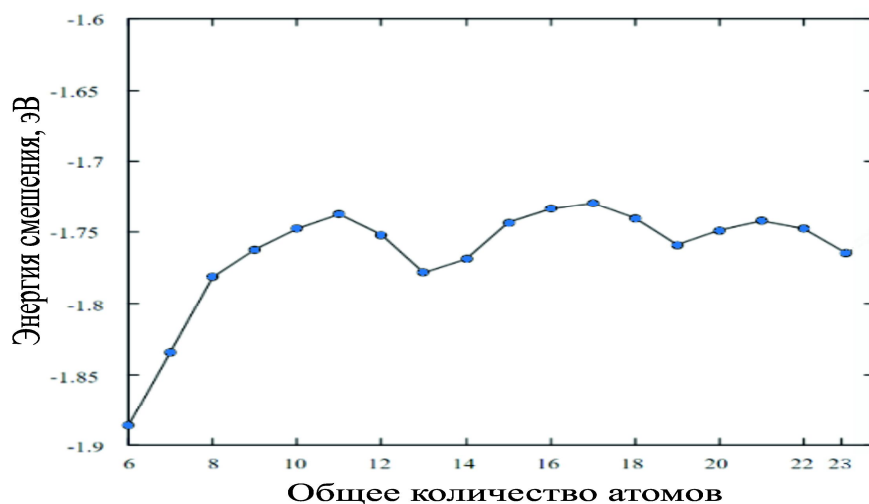


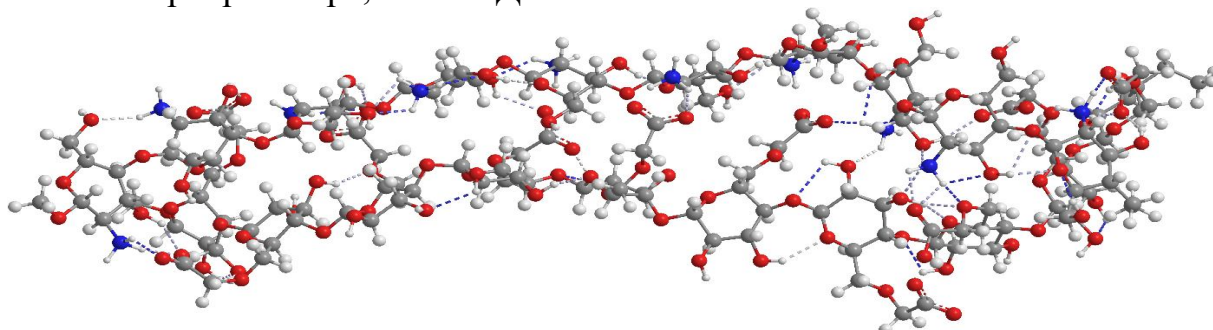
Рисунок 4. Энергия смешения кластеров  $\text{Cu}_3\text{Ag}_m$

Кластер  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{11}$  имеет кубооктаэдрическую структуру, очень похожую на структуру  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ , но последний имеет геометрию, более близкую к икосаэдру, чем кубооктаэдру. По этой причине данный кластер является одним из самых устойчивых, так как в икосаэдрической структуре стерические эффекты, связанные со структурой малы. Наиболее устойчивые кластеры ( $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{15}$  и  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$ ), как правило, ведут себя как их чистый Ag.

Степень деацетилирования (СДА) и молекулярная масса являются решающими параметрами для выбора ПЭ. ХЗ является катионным полиэлектролитом в кислой среде, где pH находится ниже pKa ХЗ (ниже 6,4) и, будучи нетоксичным для организма человека и окружающей среды, биосовместим и биоразлагаем. В этой части работы мы исследовали зависимости от степени деацетилирования, реакционную способность ацетамидной и аминогрупп в составе ХЗ, взаимодействие ХЗ с Na-КМЦ и устойчивость их интерполимерных комплексов.

Проводили расчеты по изучению взаимодействия цепочек ХЗ содержащими разное количество ацетамидных и аминогрупп с цепочкой КМЦ. Как показали результаты расчетов (рис. 5), при увеличении количества ацетамидных групп в цепи ХЗ, не происходит очевидного взаимодействия между молекулярными цепями КМЦ и ХЗ, т.е., это указывает на то, что полиэлектролитный комплекс не может образовываться в нейтральных условиях. Расчеты показали наименьшее значение энергии взаимодействия - 8,9077 кДж/моль, для комплекса ХЗ, в структуре цепи которого только протонированные аминогруппы. По мере повышения кислотности и увеличения положительно заряженных аминогрупп в цепи ХЗ происходило взаимодействие с образованием устойчивого ПЭК, как для цепочек содержащих и ацетамидные группы, так и непротонированные аминогруппы.

Механизм образования полиэлектролитного комплекса, выявленный с помощью молекулярно-динамического моделирования, согласуется с экспериментальными данными о том, что полиэлектролитные комплексы ХЗ-КМЦ образуются за счет электростатического взаимодействия между заряженными группами  $-\text{NH}_3^+$  и групп  $-\text{COO}^-$  КМЦ, т.е. на данный процесс влияет как pH раствора, так и СДА ХЗ.

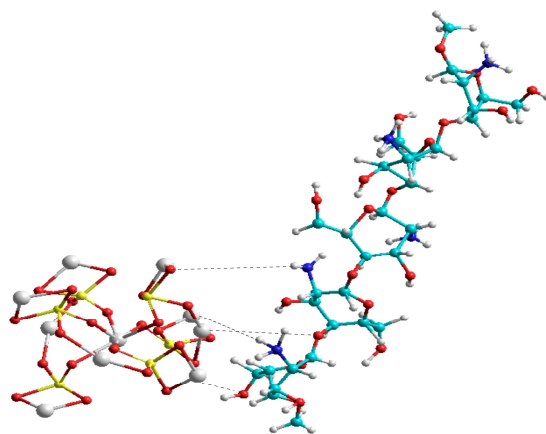


**Рисунок 5.** Модель взаимодействия цепочки из 10 звеньев ХЗ с КМЦ, содержащей только протонированные аминогруппы с цепочкой из 10 звеньев Na-КМЦ Энергия взаимодействия = -2129 Ккал/моль / -8,907736 кДж/моль

Наноконпозиты на основе ХЗ, в том числе и гидроксиапатитом (ГА) могут быть использованы в качестве базового материала для каркасных

устройств и в качестве средств модификации используемых в настоящее время биомедицинских устройств для повышения эффективности регенерации тканей. Механизм образования нанокompозитов исследовался в ряде статей по изучению взаимодействий в системах биополимер/ГА в которых рассматривалось взаимодействие биополимеров со структурными частями ГА, т.е. ионами  $\text{Ca}^{2+}$  и  $\text{PO}_4^{3-}$ . При взаимодействии ХЗ с ГА ионы  $\text{Ca}^{2+}$  играют конкурирующую роль, ионы кальция появляются на поверхности кристаллов ГА и прочно удерживают структуру за счет электростатических связей, т.е. ХЗ образует поперечная связь между  $-\text{NH}_2$  и ионами  $\text{Ca}^{2+}$  ГА. В данной части мы рассматриваем взаимодействие пентамера ХЗ со структурой ГА, чтобы лучше понять процесс их взаимодействия.

Энергия адсорбции, перенос заряда и равновесное расстояние для наиболее стабильной структуры составляют  $-1,44$  эВ,  $1,073$  Å и  $0,246$  э соответственно. Высокое значение энергии адсорбции свидетельствует о хемосорбции ГА на поверхности ХЗ. Равновесное расстояние (ближайший атом ГА и ХЗ) составляет около  $2,053$  Å в системе ГА/ХЗ. Наиболее благоприятная структура ГА на поверхности ХЗ после оптимизации показана на рис. 6. Структура ГА расположена перпендикулярно поверхности цепи ХЗ. Мы наблюдали три следующих взаимодействия: атом N протонированной аминогруппы ( $-\text{NH}_3^+$ ) ХЗ взаимодействует с атомом O ГА, атом O карбоксильной группы ( $-\text{OH}$ ) ХЗ взаимодействует с P- атом ГА, атом O карбоксильной группы ( $-\text{OH}$ ) ХЗ взаимодействует с катионом  $\text{Ca}^{2+}$  ГА. Полученные результаты сравнения энергии адсорбции и равновесного расстояния между атомами свидетельствуют о том, что энергия адсорбции между атомом N протонированной аминогруппы ( $-\text{NH}_3^+$ ) ХЗ и атомом O ГА больше, чем у других взаимодействий, равновесное расстояние составляют  $1,073$  Å соответственно.



**Рисунок 6.** Оптимизированная структура композита ГА/ХЗ в наиболее стабильной конфигурации.

Результаты расчетов термодинамических параметров и ширины запрещенной зоны представлены в табл. 6. По результатам значений ширины запрещенной зоны и сопоставлению данных расчета взаимодействие имеет меньшее значение ширины запрещенной зоны и считается более стабильным с термодинамической точки зрения.

**Таблица 5.**

Расчетные теплота образования, энтальпия, теплоемкость, энтропия, свободная энергия и ширина запрещенной зоны при взаимодействии ГА/ХЗ при 300 К.

Система	Теплота образования, ккал/моль	Энтальпия, ккал/моль	Свободная энергия, ккал/моль	Запрещенная зона, эВ
ГА/ХЗ	-491.93	19.445	-553.42	5.98
ГА	-352.75	13.571	-389.426	6.83
ХЗ	-365.407	15.576	-415.588	9.49

В табл. 6 представлены рассчитанные изменения числа электронов, зарядов и полного дипольного момента исследуемого взаимодействия.

**Таблица 6.** Рассчитанные параметры (полный дипольный момент ( $\mu$ , дебай) и заряды) взаимодействия ГА/ХЗ.

	ГА/ХЗ	ХЗ
Полный дипольный момент	8.789	2.745
N-атом (2)	-0.3052	-0.4126
O-атом (1)	-0.4713	-0.4421
соединение с атомом O	-0.3265	-0.3948
H-атом (2)	0.3651	0.2684
Без электронов		
N-атом (2)	5.3128	5.3021
O- атом (1)	6.5221	6.4741
соединение с атомом O	6.3485	6.4034
H-атом (2)	0.6354	0.7542

Результаты расчетов свидетельствуют об увеличении парциальных зарядов атома азота и атома кислорода звена 2 ХЗ. Взаимодействие атома О ГА с атомом водорода звена 2 ХЗ, привело к увеличению заряда Н-атом. Что касается рассчитанного числа электронов, то произошло уменьшение количества электронов обоих атомов N с атомом O ХЗ звена 2 по сравнению с этими атомами звеньев ХЗ без учета взаимодействия. Приведенные выше результаты показали отсутствие переноса электрона без отражения процесса ионизации в результате процесса взаимодействия. Суммарные дипольные моменты увеличены для всех схем. Рассчитанные значения дипольного момента отражают тот факт, что структура композита стала более реакционно способной по сравнению с ХЗ.

Также рассчитана и проанализирована электронная плотность состояний (ЭПС) композита для объяснения природы связывания. Вблизи уровня Ферми влияет адсорбция ГА на поверхность цепи ХЗ, и вблизи уровня Ферми становятся видны дополнительные пики, что демонстрирует, то, что произошла гибридизация между ГА и ХЗ. В результате спектры ЭПС ГА до и после адсорбции изменялись, а их энергетический уровень смещался за счет химического взаимодействия. Таким образом, изменение уровня Ферми ГА ( $E_f = -5,99$  эВ) и композита ГА/ХЗ ( $E_f = -5,34$  эВ) заметно демонстрирует перенос заряда между ГА и ХЗ в процессе адсорбции.

Результаты по энергии адсорбции и равновесному расстоянию для ГА на поверхность цепи ХЗ свидетельствуют о том, что энергия адсорбции имеет большую величину, а равновесное расстояние между ГА на цепи ХЗ представляет собой малое расстояние. Сопоставление полученных результатов показало, что при отсутствии переноса электронов и последующей ионизации увеличивается общий дипольный момент. В соответствии с литературными данными и результатами расчетов нами была предложена модель наночастицы ГА/ХЗ.

## ВЫВОДЫ

На основе проведенных исследований по диссертационной работе на соискание ученой степени доктора философии (PhD) на тему: «Электронные характеристики и реакционная способность производных хитозана» сформулированы следующие выводы:

1. Показано, что хлорсульфоновая кислота была идентифицирована как одна из органических кислот с наибольшим потенциалом взаимодействия с хитозаном при получении сульфат производных в рамках анализа квантовой стабильности, также впервые получена математическая модель реакции сульфатирования хитозана;

2. Получена модель наночастицы аскорбата хитозана, идентифицирован перенос протона с энергиями взаимодействия, а именно хитозан-аскорбиновая кислота (-6,82 ккал/моль), хитозан-триполифосфат (-4,56 ккал/моль) в водной фазе. Показано, что в процессе формирования наноаскорбата хитозана за счет образования донорно-акцепторной связи между аминогруппами хитозана с енольной группой аскорбиновой кислоты и относительной координацией хитозана с триполифосфатом;

3. Получены модели взаимодействия хитозана с аминокислотами, входящими в состав белка *Bombux mori*, рассчитанные значения показателей реакционной способности и стабильности комплексов, показана стабильность комплексов хитозана с аминокислотами, результаты расчетов указывают на наличие сильной термодинамической движущей силы при комплексообразовании;

4. Показано, что amino- и гидроксильные группы хитозана ответственны за стабилизацию и комплексообразование наночастиц Ag с хитозаном, изучены биметаллические кластеры состава  $Cu_3Ag_m$  ( $3 \leq m \leq 20$ ), показано, что они имеют тенденцию представлять сегрегированный образец субкластера, где атомы Ag образуют интерфейс с атомами Cu, согласно электронной структуре наиболее устойчивые кластеры ( $Cu_3Ag_{10}$ ,  $Cu_3Ag_{15}$  и  $Cu_3Ag_{20}$ ), как правило, ведут себя как их чистый Ag;

5. Показано, что полиэлектролитные комплексы хитозан-КМЦ образуются за счет электростатического взаимодействия между заряженными группами  $-NH_3^+$  и групп  $-COO^-$  КМЦ, расчеты показали наименьшее значение энергии взаимодействия -8,907 кДж/моль, для комплекса хитозана, в структуре цепи которого только протонированные аминогруппы, на данный процесс влияет как pH раствора, так и степень

деацетилирования хитозана;

**6.** Получена модель взаимодействия пентамера хитозана со структурной частью гидроксиапатита, результаты по энергии адсорбции и равновесному расстоянию для гидроксиапатита на поверхность цепи хитозана свидетельствуют о том, что энергия адсорбции имеет большую величину, а равновесное расстояние составляет 1,073 Å. Сопоставление полученных результатов показало, что при отсутствии переноса электронов и последующей ионизации увеличивается общий дипольный момент системы.

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD SCIENTIFIC DEGREES  
DSc. 02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 AT INSTITUTE OF POLYMER  
CHEMISTRY AND PHYSICS**

---

**INSTITUTE OF POLYMER CHEMISTRY AND PHYSICS**

**BURKHANOVA NILUFAR JALOLITDINOVNA**

**ELECTRONIC CHARACTERISTICS AND REACTIVITY OF CHITOSAN  
DERIVATIVES**

**01.04.06 – Polymer physics**

**DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)  
ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

**Tashkent-2023**

**The theme of doctor of philosophy (PhD) has been registered by the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan with registration numbers of B2023.2.PhD/FM891.**

The dissertation was carried out at the Institute of polymer chemistry and physics.

The abstract of dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) is available online (polchemphys.uz) and on the website of "ZiyoNET" information-educational portal (www.ziynet.uz).

**Scientific supervisor:** **Nurgaliyev Ilnar Nakipovich**  
doctor of physical and mathematical sciences,  
senior scientific researcher

**Official opponents:** **Potyomkin Igor Ivanovich**  
doctor of physical and mathematical sciences, professor

**Abdurakhmanov Umarbek**  
doctor of physical and mathematical sciences, professor

**Lead organization:** **Namangan state university**

The defense of the dissertation will take place on "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 2023 at «\_\_\_» hours at a meeting of the Scientific Council DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 at the Institute of Polymer Chemistry and Physics (Address: 100128, Tashkent city, Abdulla Kadiri str., 7<sup>b</sup>. Ph: (+99871) 241-85-94; fax: (+99871) 241-26-61, e-mail: [polymer@academy.uz](mailto:polymer@academy.uz)).

The dissertation can be reviewed at the Information Resource Centre of the Institute of Polymer Chemistry and Physics (registration number \_\_\_ (Address 100128, Tashkent city, Abdulla Kadiri str., 7<sup>b</sup>. Ph: (+99871) 241-85-94).

The abstract of the dissertation has been distributed on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 year.  
(Protocol at the register № \_\_\_ dated «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 year).

**S.Sh. Rashidova**  
Chairman Scientific council for  
awarding the scientific degrees, doctor of  
chemical sciences, professor, Academician.

**M.M. Usmanova**  
Scientific Secretary of Scientific council  
for award of scientific degrees,  
candidate of chemical sciences, senior researcher

**S.S. Negmatov**  
Chairman of Scientific seminar under  
Scientific council for awarding the scientific degrees,  
doctor of technical sciences, professor, academician

## INTRODUCTION (abstract of doctor of philosophy (PhD) thesis)

**The aim of research work** consists in theoretical study of the interaction of chitosan with various compounds to describe the formation of its derivatives, their reactivity, as well as for theoretical confirmation of literary experimental results.

**The object of research work** are natural polymers –chitosan, sulfate chitosan, ascorbate chitosan, polymolecular complexes of chitosan with Bombyx mori protein, bimetallic clusters, chitosan-carboxymethylcellulose complexes, chitosan/hydroxyapatite composite.

### **The scientific novelty of the research work:**

for the first time, by comparing the calculated numerical values of the boundary molecular orbitals, it was shown that chlorosulfonic acid was identified as one of the organic acids with the greatest potential for interaction with chitosan in the preparation of sulfate derivatives;

for the first time, by studying the interaction of chitosan-ascorbic acid-tripolyphosphate based on density functional theory, a model of chitosan ascorbate nanoparticle was obtained;

for the first time, based on density functional theory, models of the interaction of chitosan with amino acids that make up the Bombyx mori protein, calculated values of indicators of reactivity and stability of the complexes were obtained;

the electronic characteristics of bimetallic clusters of composition  $\text{Cu}_3\text{Ag}_m$  ( $3 \leq m \leq 20$ ) were calculated, it was shown that they tend to represent a segregated sample of a subcluster, where Ag atoms form an interface with Cu atoms, according to the electronic structure the most stable clusters ( $\text{Cu}_3\text{Ag}_{10}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{15}$  and  $\text{Cu}_3\text{Ag}_{20}$ );

it has been shown that polyelectrolyte complexes of chitosan-CMC are formed due to electrostatic interaction between the charged groups  $-\text{NH}_3^+$  and  $-\text{COO}^-$  groups of CMC; this process is influenced by both the pH of the solution and the degree of deacetylation of chitosan;

for the first time, based on density functional theory, a model of the interaction of chitosan pentamer with the structural part of hydroxyapatite has been obtained; the adsorption energy is large and the equilibrium distance is 1.073 Å. A comparison of the results obtained showed that in the absence of electron transfer and subsequent ionization, the total dipole moment of the system increases.

**Implementation of research results.** Based on the results obtained from theoretical studies of chitosan derivatives, their structure and reactivity:

developed theoretical models, in particular, the results of a theoretical study of the reaction of chitosan with sulfating agents (chlorosulfonic and sulfamic acids) and the study of reaction products - sulfated derivatives of chitosan, the results of establishing a model of chitosan ascorbate nanoparticles, the formation and stabilization of bimetallic Cu/Ag clusters were used in the research project FRG # FRG23-C-S56 Joint Research Center of the American University of Sharjah, UAE American University of Sharjah (letter from the American University of Sharjah

10/03/2023). As a result, the possibility of modifying experiments and establishing new patterns of interaction of chitosan with various compounds was shown;

quantum theoretical calculations, calculated characteristics and an optimized model of the interaction of the monomeric form of chitosan with chlorosulfonic acid (CSA), calculated values of reactivity descriptors for sulfo-derivatives of chitosan were used within the framework of a project supported by Fudan University (letter from Fudan University, China 11/13/2023 ). As a result, the reactivity of the O-sulfate derivative of chitosan was substantiated

**The structure and volume of the thesis.** The dissertation consists of an introduction, three chapters, a conclusion and a list of cited literature. The volume of the dissertation is 110 pages.

**E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I bo'lim (I chast; part I)**

1. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш., Ашуров Н.Р. Сравнительный анализ квантово-химических методов для расчета электронных характеристик политиофенов используемых в солнечных элементах// Евразийский Союз Ученых (ЕСУ)., 2020. Т.6, № 9 (78). -С. 42-46. (№18 Ulrich's Periodicals Directory, №35 CrossRef).

2. Burkhanova, N.J., Nurgaliev, I.N., Rakhmanova, V.N., Rashidova, S.S. Computer simulation of sulfated chitosan derivatives // International Journal of Computational Materials Science and Engineering., 2022, V.12, No.01, -pp. 1-12. (Scopus, IF=0.86).

3. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. “Теоретическое исследование структуры и электронных характеристик хитозан-стабилизированных наночастиц Cu/Ag. // Доклады Академии наук Республики Узбекистан., №1, 2023 г., С.44 – 50. (01.00.00. №7).

4. Бурханова Н.Ж., Нургалиев И.Н., Рашидова С.Ш. Изучение взаимодействия при получении нанокompозита хитозан/гидроксиапатит.// Композиционные материалы №3, 2023, -С.16-19. (02.00.00 №4)

5. Matyakubov V.M., Karabayeva M.A., Burkhanova N.J. and Eslamasov M., Mechano-Optical Study of the Deformation of Polymer Films.// Phys. Chem. Res., 2023, V.12, No.2, 393-406, (Scopus, IF=1.3).

**II bo'lim (II chast; part II)**

1. Бурханова Н.Ж., Нургалиев И.Н. Компьютерное моделирование структуры наноаскорбата хитозана // Ёш олимлар ахборотномаси, №2 (4) 2022, -С.96-99.

2. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. DFT investigation of chitosan/hydroxyapatite interaction for nanocomposite creation. // Uzbekistan Journal of Polymers V.2. Issue 2, 2023 Special Issue, 81-89.

3. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Оксенгендлер Б.Л., Рашидова С.Ш. Использование квантово-химической теории реакционной способности для оценки совместимости полимеров// Международная Узбекско-Белорусская Научно-техническая конференция: Композиционные и металлополимерные материалы для различных отраслей промышленности и сельского хозяйства. Ташкент, 2020. -С 247-248.

4. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж. Моделирование электронных характеристик органических нанополупроводников// Materials of the Republican 18-multidisciplinary online distance conference on "scientific and practical research in Uzbekistan" part-17, 2020. -С.67-68.

5. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Молекулярно-динамическое исследовани наночастиц хитозана// Республиканская научная конференция: Современные проблемы науки о полимерах. -Ташкент: ИХФП АН РУз, 2020. -С. 60-62.

6. Нурғалиев И.Н., Рахманова В.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Реакционная способность сульфатированных производных хитозана//II Коршаковская Всероссийская с международным участием конференция: Поликонденсационные процессы и полимеры. -Москва, 2021, -С. 28.

7. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Электронные свойства и реакционная способность полисахаридов// Физическая и аналитическая химия природных и техногенных систем : сборник трудов Всероссийской конференции с международным участием. -Дубна, 2021. -С. 121-124.

8. Рахманова В.Н., Бурханова Н.Ж., Нурғалиев И.Н., Рашидова С.Ш. Электронная структура сульфатированных производных хитозана// Материалы Республиканской конференции Роль одаренной молодежи в развитии физики. -Ташкент: НУУ, 2021. -С. 44-45

9. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. A model for chitosan/hydroxyapatite interaction// Материалы Республиканской конференции: Роль одаренной молодежи в развитии физики. -Ташкент: НУУ, 2021. -С. 74-75

10. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Электронные свойства и реакционная способность полисахаридов // Материалы Всероссийской конференции с международным участием: Физическая и аналитическая химия природных и техногенных систем. Россия, 2021.

11. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж. Расчеты статической электронной структуры взаимодействия хитозана с катионами металлов//“XXI асп - интеллектуал ёшлар асри” мавзусидаги Республика илмий ва илмий-амалий анжуман. 24 апрель 2021 й., с. 190-191.

12. Бурханова Н.Ж., Нурғалиев И.Н. Компьютерное моделирование образования наноструктурированных образцов хитозана // Республика илмий ва илмий-амалий анжуман: XXI асп - интеллектуал ёшлар асри. –Ташкент, 2021. -с. 163-165.

13. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. Calculation of the electronic structure of chitosan for the formation of nanoparticles by ionotropic gelation with tripolyphosphate // Республика илмий-амалий конференцияси: Физиканинг ривожиди фундаментал инновацион тадқиқотлар ва унинг истиқболлари. –Ташкент, 2021. -С. 68-70.

14. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Особенности электронного строения и реакционной способности некоторых полисахаридов «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің заманауи аспектілері: теориясы және практикасы» атты халықаралық ғылыми-практикалық конференция материалдары. – Алматы: ҚазҰПУ, 2021. -С. 3-6.

15. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Зонная структура и реакционная способность хитозана // Республика илмий-амалий анжумани материаллари: Яримўтказгичлар ва полимерлар физикасининг долзарб муаммолари. –Ташкент, 2022. -С. 126-127.

16. Нурғалиев И.Н., К.К.Пирниязов, Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Компьютерное моделирование образования наночастиц аскорбата хитозана // “Яримўтказгичлар ва полимерлар физикасининг долзарб муаммолари”

мавзусидаги хорижий олимлар иштирокида Республика илмий-амалий анжумани материаллари. –Ташкент, 2022. -С. 137-138.

17. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж. Электронные характеристики и реакционная способность полисахаридов // Республика илмий-амалий анжумани материаллари: Яримўтказгичлар ва полимерлар физикасининг долзарб муаммолари. –Тошкент, 2022. -С. 182-183.

18. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Исследование взаимодействия хитозан-аминокислотных комплексов, входящих в белок, выделенный из куколок шелкопряда *Bombyx mori*// Республика илмий-амалий конференцияси: Комплекс бирикмалар кимёси ва аналитик кимё фанларининг долзарб муаммолари. –Ташкент, 2022. -С.189-191.

19. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. Quantum-chemical study of the reactivity of the functional groups of silk fibroin// Республика илмий-амалий конференцияси: Комплекс бирикмалар кимёси ва аналитик кимё фанларининг долзарб муаммолари. –Тошкент, 2022, С.230-232

20. Нургалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Исследование взаимодействия хитозан-аминокислотных комплексов, входящих в белок, выделенный из куколок шелкопряда *Bombyx mori*// Republican scientific-practical conference: Role of biological chemistry in modern medicine - yesterday, today and tomorrow. –Bukhara, 2022. -С. 111-113.

21. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S. Sh. Molecular simulation of a nanofibers formation// Мавзусидаги Республика илмий-амалий анжумани: Кимёнинг ривожиди фундаментал, амалий тадқиқотлар ва уларнинг истиқболлари. – Ташкент, 2022. -С. 303-304.

22. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S. Sh. DFT calculations of the reactivity of the structure of silk fibroin// Узбекско-Казахский Симпозиум: Современные проблемы науки о полимерах. –Ташкент, 2022. -С. 71-72.

23. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S. Sh. Theoretical investigations of electrospinning process and nanofibrous preform// Узбекско-Казахский Симпозиум: Современные проблемы науки о полимерах. - Ташкент, 2022, -С. 72-74.

24. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. DFT investigation chitosan-stabilized Cu/Ag nanoparticles// International Scientific Conference “Actual Problems of The Chemistry of Natural Compounds. -Tashkent, 2023. -P. 212.

25. Бурханова Н. Ж., Нургалиев И.Н. DFT исследование наночастиц cu/ag, стабилизированных хитозаном// XXIX Каргинские чтения. Всероссийская конференция: Физика, химия и новые технологии. -Тверь, 2023. -С.41.

26. Nurgaliev I. N., Burkhanova N. J., Rashidova S. Sh. Modeling of chitosan nanoparticles formed using sulfate anions as crosslinking bridges// Respublika ilmiy amaliy konferensiyasi: Fizika fanining rivojida iste’dodli yoshlarning o‘rni. – Toshkent, 2023. 119-121 b.

27. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. Theoretical investigation of carboxymethylcellulose-chitosan polyelectrolyte complexe// akademik G‘.R. Raxmonberdiyevning 85 yilligiga bag‘ishlangan Xalqaro ilmiy-

texnikaviy konfirensiyasining ilmiy ishlar to'plami: Sellyuloza va sellyuloza hosilalarining rivojlanish istiqbollari. –Toshkent: Toshkent Kimyo-texnologiya instituti, 2023. 179-180 b.

28. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. Chitosan-carboxymethylcellulose-based polyelectrolyte: a theoretical study proceedings// International scientific and practical conference: Modern trends of higher education and science in the field of chemistry and chemical engineering, dedicated to the 90th anniversary of the birth of Academician of the NAS RK E.M. Shaikhutdinov, -Almaty: Al-Farabi KazNU 2023, -P. 99-100.

29. Нурғалиев И. Н., Бурханова Н. Ж., Рашидова С. Ш. Математическая модель процесса коагуляции при образовании нановолокон хитозана// Международная научно-практическая конференция: Фундаментальные и практические аспекты функциональных полимеров. -Ташкент, 2023, -С.380-383.

30. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Теоретическое описание процесса коагуляции хитозана при образовании нановолокон// X Международная конференция: Физикохимия растительных полимеров. - Архангельск, 2023. -С.158-161.

31. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. DFT investigation of chitosan nanoparticles formed using sulfate anions as crosslinking bridges// Международная конференция: Фундаментальные и прикладные аспекты исследований хитина и его производных, -Ташкент, 2023. -С. 92-93

32. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш. Молекулярно-динамическое исследование влияния рН среды на размер наночастиц хитозана. Международная конференция: Фундаментальные и прикладные аспекты исследований хитина и его производных. –Ташкент, 2023. -С. 99-101.

33. Nurgaliev I.N., Burkhanova N.J., Rashidova S.Sh. DFT investigation on the interaction of chitosan with collagen// Современные перспективы в исследовании хитина и хитозана Шестнадцатая Всероссийская конференция с международным участием. –Владивосток, 2023. -С. 50-54

34. Бурханова Н.Ж., Нурғалиев И.Н., Рашидова С.Ш., Электронные характеристики и реакционная способность производных хитозана, Казахско-Узбекский Симпозиум: Современные проблемы науки о полимерах. – Алматы, 2023. -С.51-53.

35. Нурғалиев И.Н., Бурханова Н.Ж., Рашидова С.Ш., Моделирование образования хитозановых нановолокон// Казахско-Узбекский Симпозиум: Современные проблемы науки о полимерах. –Алматы, 2023. -С.83-86.

36. Бурханова Н.Ж., Нурғалиев И.Н. Современные методы компьютерного моделирования полисахаридов: наночастицы, нановолокна // XII Международной научно-практической конференция: Science and education in the modern world: challenges of the XXI century. – Астана, 2023. – С. 32-36.

Avtoreferat “O‘zbekiston polimerlar jurnali” tahririyatida tahrirdan o‘tkazilib, o‘zbek, rus, va ingliz tillaridagi matnlar o‘zaro muvofiqlashtirildi.

Bosishga ruxsat etildi: 05.12.2023 y.  
Bichimi: 60x84 <sup>1/16</sup> «Times New Roman»  
garniturada raqamli bosma usulda bosildi.  
Shartli bosma tabog‘i 2.9. Adadi 100. Buyurtma: № 290  
Tel: (99) 832 99 79; (99) 817 44 54  
Guvohnoma reestr № 10-3279  
“IMPRESS MEDIA” MCHJ bosmaxonasida chop etildi.  
Manzil: Toshkent sh., Yakkasaroy tumani, Qushbegi ko‘chasi, 6 uy.