

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ
ТОШКЕНТ КИМЁ-ТЕХНОЛОГИЯ ИНСТИТУТИ

«Умидли кимёгарлар-2017»

ЁШ ОЛИМЛАР, МАГИСТРАНТЛАР ВА БАКАЛАВРИАТ
ТАЛАБАЛАРИНИ XXV - ИЛМИЙ-ТЕХНИКАВИЙ
АНЖУМАНИНИНГ МАҚОЛАЛАР ТЎПЛАМИ



ТРУДЫ
XXVI - НАУЧНО- ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ, МАГИСТРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
БАКАЛАВРИАТА

ТОШКЕНТ 2017

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ
ТОШКЕНТ КИМЁ-ТЕХНОЛОГИЯ ИНСТИТУТИ**

«Умидли кимёгарлар-2017»

**ЁШ ОЛИМЛАР, МАГИСТРАНТЛАР ВА БАКАЛАВРИАТ
ТАЛАБАЛАРИНИ XXV - ИЛМИЙ-ТЕХНИКАВИЙ
АНЖУМАНИНИНГ МАҚОЛАЛАР ТЎПЛАМИ**

18-21 апрель

ТРУДЫ

**XXVI - НАУЧНО- ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ, МАГИСТРАНТОВ И СТУДЕНТОВ
БАКАЛАВРИАТА**

ТОШКЕНТ 2017

Ушбу тўпламда ёш олимлар, магистратура ва бакалаврият талабаларининг анъанавий XXVI -«Умидли кимёгарлар-2017» илмий-техникавий анжуманини маъруза матнлари ўрин олган. Тўпламда нашр этилаётган мақолалар инновацион фаолиятга йуналтирилган бўлиб, илмий тадқиқот ишларини натижаларидан иборат, ноорганик ва органик моддалари асосида олинган маҳсулотларнинг ишлаб чиқариш технологияси, янги инфор­мацион технологиялар яратиш, атроф муҳит ҳимояси, экологик тоза озиқ-овқат маҳсулотларини ишлаб чиқариш, кимё саноатининг маркетинги ва менежменти, таълим ва педагогик маҳорат ва яна бир қатор турли муаммоларга бағишланган.

Муаллифлар мақолалар мазмунига жавобгардирлар.

Сборник трудов XXVI научно-технической конференции «Умидли кимёгарлар-2017» направлен на развитие инновационной деятельности, отражает результаты исследований молодых ученых, магистрантов и студентов бакалавриата в области разработки технологии и получения эффективных материалов на основе органических и неорганических веществ. Создания новых информационных технологий, проблемам охраны окружающей среды, получению экологически чистых пищевых продуктов, а также освещает вопросы менеджмента и маркетинга, проблемы образования и педагогики химической и пищевой промышленности и ряд других проблем.

Авторы статей несут ответственность за их содержание.

Тахририят хайъати:
д.т.н., проф. Туробжонов С.М.
к.т.н., доц.Адилов Р.И.
к.т.н. Кадырова Д.С.
с.н.с. Арипова Б.Х.

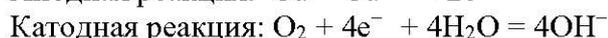
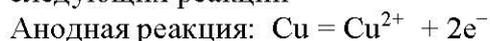


МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ В КИСЛЫХ СРЕДАХ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМИДАЗОЛА

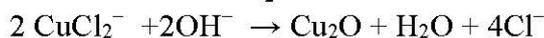
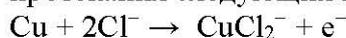
Хикматуллаев Х.Ф., Кадирова З.Ч.
Ташкентский химико-технологический институт

Известно, что для многих эффективных ингибиторов коррозии в кислых средах характерно наличие в молекуле нескольких гетероциклических атомов азота и некоторых других полярных групп. Подобные органические молекулы могут адсорбироваться на металлической поверхности, при этом химическая связь может быть образована с участием электронной пары атомов N и/или π -электронного облака, таким образом, уменьшается коррозия металлов в кислых средах. Антикоррозионное действие органических молекул может быть объяснено адсорбцией на поверхности металла. Физическая адсорбция хотя и является слабой, но обязательно предшествует хемосорбции. Так как поверхность меди заряжена положительно в кислом растворе, органические молекулы, имея отрицательно заряженные центры, могут адсорбироваться на поверхности металла. Предполагается, что молекулы адсорбируются параллельно к поверхности, что обуславливает взаимосвязь между рассчитанным зарядом и эффективностью ингибирования. Хорошие корреляции были найдены между антикоррозионной активностью и распределением электронной плотности.

Основной процесс коррозии в кислых средах можно описать в общем виде с помощью следующих реакций



Кроме того коррозия меди в солянокислых средах связана с возможностью протекания следующих процессов:



В литературе изучены электронные структуры ингибиторов коррозии, влияние на коррозию высшей занятой (ВЗМО) и низшей свободной молекулярных орбиталей (НСМО), липофильность и гидрофильность молекул [1-3]. Наблюдаемая взаимосвязь между зарядом и эффективностью ингибирования для молекул с планарной структурой может объясняться хемосорбцией органических молекул, которая происходит благодаря хелатированию на металлической поверхности.

В настоящей работе обсуждается корреляционная зависимость противокоррозионной активности (Р, %) имидазола[3] и различных производных бензимидазола (рис.1) при коррозии меди в 1 М растворах HCl с некоторыми расчетными квантово-химическими параметрами в пакете программ HyperChem 7.0, AccelrysMSModeling 3.0.1 на персональном компьютере Intel Pro Pentium. Были получены экспериментальные данные по зависимости данных гравиметрического измерения антикоррозионного действия ($P_{\text{эксп}}$, %) и некоторых квантово-химических расчетных данных (типа энергии высшей занятой молекулярной орбитали ($E_{\text{ВЗМО}}$), энергии низшей вакантной орбитали ($E_{\text{НВМО}}$), энергии электронного перехода ($E_{\text{НВМО}} - E_{\text{ВЗМО}}$), дипольного момента (μ), зарядов на атомах гетероцикла (q_{N1} , q_{N3})), используемых в качестве дескрипторов при нахождении взаимосвязи.

Установлено, что ингибирующая эффективность зависит от возможности наиболее выгодной пространственной ориентации молекулы ингибитора на поверхности металла (рис.1). Ингибирующая активность увеличивается с уменьшением $E_{\text{НВМО}} - E_{\text{ВЗМО}}$, что указывает на стабильность образующихся комплексов между металлом и ингибитором. В меньшей степени ингибирующая активность зависит от эффективных зарядов на атомах

азота и дипольном моменте. Это объясняется тем, что орбитальный контроль обуславливает определенную пространственную ориентацию, связанную с локализацией в пространстве ВЗМО и НВМО.

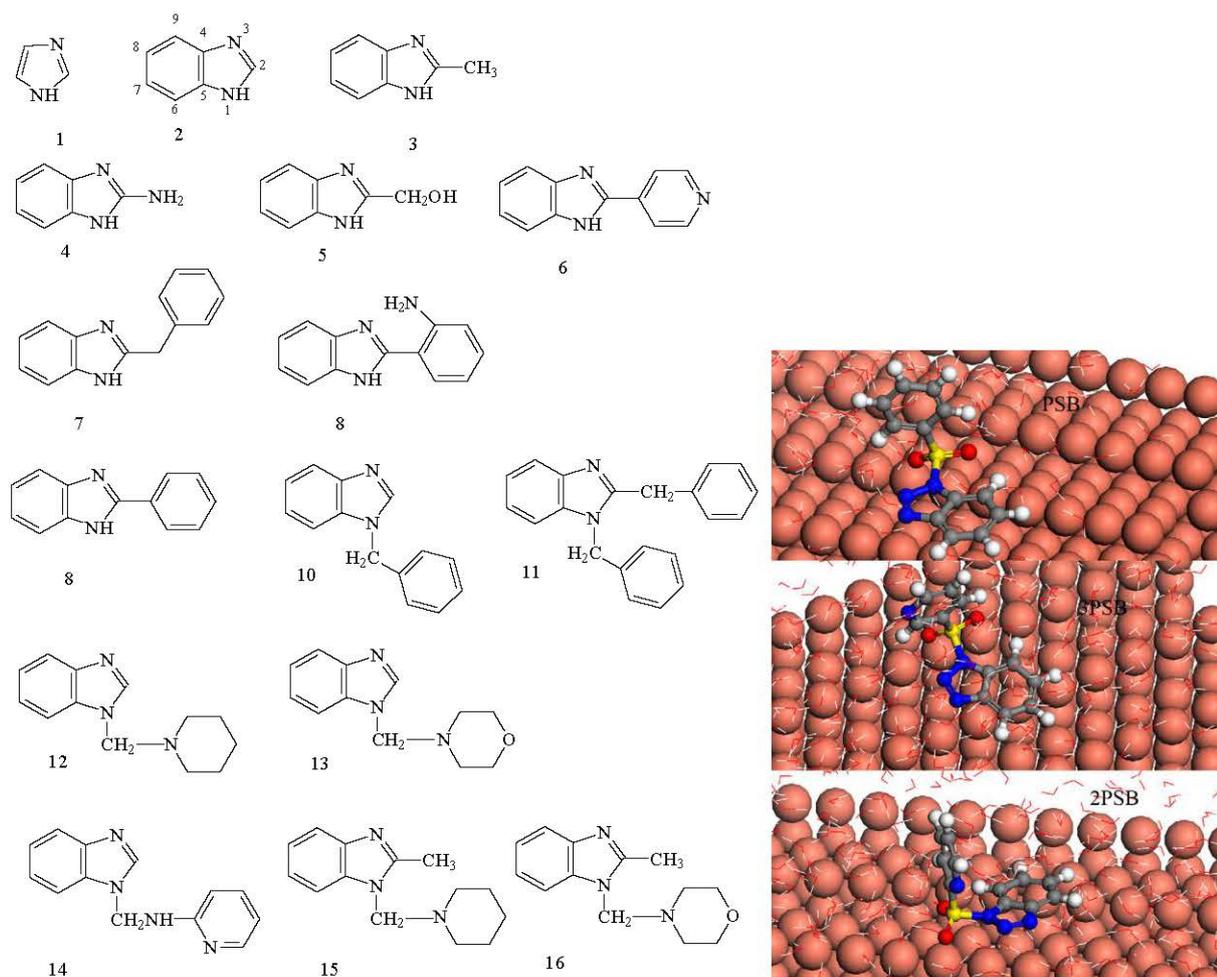


Рис. 1 Структуры производных имидазола и бензимидазола и моделирование адсорбции ингибитора к поверхности

Таким образом, в результате расчета электронных структур ряда ингибиторов коррозии из класса бензимидазолов и проведения анализа ингибирующей активности, установлена зависимость между антикоррозионным действием, энергией граничных орбиталей, зарядами на гетероатомах азота и разницы энергий электронов для протонированной формы и свободной молекулы ингибитора.

Литература

1. Раевский О.А. Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных веществ // Успехи химии.- 1999.-Т.68, № 6.-С.555-575.
3. Khan P.F., Shanthi V., Babu R.K., Muralidharan S., Barik R.C. // J. Environ. Chem. Eng. - 2015.- V. 3.-P. 10–19.
4. Khaled K.F., Fadel-Allah S.A., Hammouti B. // Mater. Chem. Phys. - 2009.- V. 117.-P. 148–155.

54.	Сержанов Ж.К. , Матниязов И.У., Мухамедбаев А.А., Газиев Д., Нурибетов Б.Ч. Повышение эффективности отстойников производства кальцинированной соды (ТХТИ)	109
55.	Тошметова З.Ш., Мухамедбаева З.А. Пути исследования отходов хризотил цемента (ТХТИ)	111
56.	Тўракулов Б.Б., Атакузиев Т.А. Изучение морозостойкости бетонов содержащих твердые отходы содового производства (ТХТИ)	113
57.	Тўракулов Б.Б. Взаимная система $K_2SO_4 + Ca(OH)_2 \leftrightarrow 2KOH + CaSO_4$ и её применение к обоснованию получения гидроксида калия методом каустификации (ТХТИ)	115
58.	Тўракулов Б.Б. Физико-химические основы получения хлорида калия из сильвинита в присутствии аммиака (ТХТИ)	117
59.	Тўракулов Б.Б., Атакузиев Т.А. Твердые отходы содового производства (ТХТИ)	119
60.	Тўракулов Б.Б., Атакузиев Т.А., Шамадинова Н.Э., Бобоқулов А.Н. Гидратация портландцемента в присутствии мраморных порошков-отходов мрамор обрабатывающих производств (ТХТИ)	121
61.	Тургунов Ш.Р., Бабаханова З. А., Арипова М.Х. Определение параметров кристаллической решетки шпинели, синтезированной в системе $MgO-Al_2O_3-SiO_2$ (ТХТИ)	123
62.	Туропов Ж.Ж., Хакимова Г.Н. Изучение кварцевых песков Карманинского месторождения в качестве сырья грунтовых стеклоэмалей (ТХТИ)	125
63.	Турсунов С.С., Ахмедов О.Р., Талипова Х.С. Новые производные гуаровой камеди (ТХТИ)	127
64.	Умаров Ш.И., Усманов И.И., Мирзакулов Х.Ч. Фосфорнокислотное обогащение мытого обожженного фосконцентрата центральных Кызылкумов (ТХТИ)	129
65.	Уралов И.Т. Алимджанова Д.И. Совершенствование процесса производства керамического кирпича способом пластического формования (ТХТИ)	131
66.	Хамидов А.М., Гуломов Ш.Т., Синтез триметаллического алюмокобальтнικельмолибденового катализатора гидропроцессов (ТХТИ, Национальный университет Узбекистана им. М.Улугбека)	133
67.	Хамидова Х.М., Абдусаттаров Ш.М. Исследование химико – технологических свойств лёссовых пород месторождения «Дашнабад» (ТКТИ)	135
68.	Хикматуллаев Х.Ф, Кадирова З.Ч. Моделирование электронных параметров ингибиторов коррозии в кислых средах на основе производных бензимидазола (ТХТИ)	137
69.	Холмуминова Д.А., Маматкулов А.К., Зиядуллаев А.Ш., Кобилова Г.И. Некоторые особенности электрохимической переработки сплавов цветных и благородных металлов (ТХТИ)	139
70.	Мамуров Б.А.Қодирова Г.Қ., Шамшидинов И.Т. Экстракция фосфат кислотни оҳактош хомашёси билан нейтраллаш асосида кальций ва магний фосфатли ўғитлар олиш жараёнини ўрганиш (Наманган муҳандислик-педагогика институти)	141
71.	Shaymanov B.A., Namozov O.M.	143