CuO/PPE-2 FUNKSIONAL MATERIALNING RENTGEN DIFFRAKSION ANALIZI (XRD)

Eshtursunov Davron Abdisamatovich
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy unversiteti
E-mail: eshtursunovd@gmail.ru
Botirov Sunnatjon Xudoyberdi o‘g‘li
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy unversiteti
E-mail: botirovsunnatjon3004@gmail.com
Abdujalilov Ilxomjon Ibrohimjon o‘g‘li
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy unversiteti
E-mail: ilhom4995898@gmail.com
Bekchanov Davronbek Jumazarovich
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy unversiteti
E-mail: bekchanovdj@gmail.com
Muxamediyev Muxtarjan Ganievich
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy unversiteti
E-mail: mmukhamediev@mail.ru

ANNOTATSIYA

Ushbu ishda polivinilxlorid asosida modifikatsiyalangan PPE-2 polimer matritsasiga mis(II) oksidi (CuO) nanozarrachalarini kiritish orqali olingan CuO/PPE-2 funksional nanokompozit materialning rentgen diffraksion (XRD) tahlili o‘tkazildi. Tadqiqotdan maqsad — nanokompozitdagi CuO nanozarrachalarining fazaviy holati, kristall tuzilishi va polimer matritsasi bilan o‘zaro ta’sirini aniqlashdir. XRD tahlili natijalariga ko‘ra, sintez qilingan CuO nanozarrachalari 01-078-0428 raqamli ICDD standart bazasiga mos monoklinik tuzilishga ega ekani aniqlandi. Kristallitlarning o‘rtacha o‘lchami Debye–Scherrer usuli bo‘yicha 32,3 nm, kristallanish darajasi esa 77 % ni tashkil etdi. Williamson–Hall usuli yordamida panjara deformatsiyasi aniqlanib, olingan qiymatlar Scherrer natijalari bilan muvofiqligi tasdiqlandi. PPE-2 matritsasida CuO zarrachalarining bir tekis taqsimlanishi difraktogrammadagi cho‘qqi kengayishi va intensivlikdagi o‘zgarishlar bilan asoslandi. Olingan natijalar PPE-2 matritsasining g‘ovak strukturasiga CuO nanozarrachalari bir tekis taqsimlanganini ko‘rsatdi, bu esa nanokompozitning strukturaviy va termik barqarorligini oshiradi. Ushbu tahlil CuO asosidagi polimer nanokompozitlar tuzilishini chuqur o‘rganish va ularning fizik-kimyoviy xossalarini boshqarish uchun muhim ilmiy asos yaratadi.

Kalit so‘zlar: polivinilxlorid, PPE-2, CuO nanozarrachalari, nanokompozit, rentgen diffraksion tahlil, Debye–Scherrer, Williamson–Hall, kristallit o‘lchami.

KIRISH

So‘nggi yillarda sintetik polimerlarni modifikatsiya qilish orqali yangi funksional polimer materiallar yaratish nanomateriallar kimyosining eng faol rivojlanayotgan yo‘nalishlaridan biriga aylandi. Polimer matritsaga metall yoki metall oksid nanozarrachalarini kiritish orqali esa ularning fizik-kimyoviy, optik va mexanik xususiyatlarini tubdan o‘zgartiradi hamda ko‘p funksiyali kompozit tizimlar hosil bo‘lishiga sabab bo‘ladi. Ayniqsa, vinil monomeri asosidagi polimerlarning strukturasini nukleofil almashinish, kovalent bog‘lanish yoki kimyoviy modifikatsiyalash orqali faol markazlarga aylantirish va ularning yuzasiga metall oksid nanozarrachalarini “cho‘ktirish” usuli orqali multifunksional (optik, katalitik, biologik faol) kompozit tizimlar yaratilmoqda.

Metall oksidlari, xususan CuO nanozarrachalari, o‘zining tor taqiqlangan soha kengligi, yuqori kimyoviy faolligi va fotokatalitik xususiyatlari tufayli ko‘plab tadqiqotlarda asosiy o‘rinni egallamoqda. CuO nanozarrachalarini polimer matritsaga kiritish materialning kimyoviy va termik barqarorligi hamda elektr o‘tkazuvchanligini oshiradi. Shu sababli CuO asosidagi polimer nanokompozitlar kataliz, sensor texnologiyalari, antibakterial qoplamalar va energiya saqlash tizimlarida keng qo‘llanilmoqda.

Bunday nanokompozitlarning tuzilishi va fazaviy holatini aniqlash ularning xossalarini nazorat qilishda muhim ahamiyatga ega. Rentgen diffraksion tahlil (XRD) usuli esa nanokompozit tarkibidagi kristall fazalarni identifikatsiya qilish, kristallit o‘lchamini aniqlash va kristall panjara deformatsiyasini baholash imkonini beradi. Shu bois ushbu tadqiqotda PVX asosida modifikatsiyalangan PPE-2 polimer matritsasiga CuO nanozarrachalarini kiritish orqali olingan CuO/PPE-2 funksional nanokompozit materialning rentgen diffraksion tahlili amalga oshirildi.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

So‘nggi yillarda sintetik polimerlarni modifikatsiya qilish orqali yangi avlod funksional materiallarni yaratish bo‘yicha tadqiqotlar jadal rivojlanmoqda. Bunday materiallar o‘zlarining noyob fizik-kimyoviy, optik va biologik xossalari, shuningdek, struktur-faollik bog‘liqligi tufayli yuqori texnologik jarayonlarda keng qo‘llanilmoqda [1–3]. Ayniqsa, polimer matritsaga metall oksidli nanozarrachalarni kiritish yo‘li bilan ularning xossalarini boshqarish nanomateriallar kimyosining eng istiqbolli yo‘nalishlaridan biri hisoblanadi.

Metall oksidlari orasida mis(II) oksidi (CuO) o‘zining tor taqiqlangan soha kengligi (1,2–2,0 eV), yuqori sirt faolligi va kimyoviy barqarorligi bilan ajralib turadi [4]. CuO

nanozarrachalari p-tipli yarim o‘tkazgich xususiyatiga ega bo‘lib, monoklinik (tenorit) tuzilishida kristallanadi. Ularning o‘lchami 1–100 nm diapazonda bo‘lganda, kvant o‘lcham effekti hisobiga optik, elektr va katalitik xossalar sezilarli darajada o‘zgaradi. Shuning uchun CuO asosidagi nanokompozitlar fotokataliz, sensor texnologiyalari, antibakterial qoplamalar va energiya saqlash tizimlarida keng qo‘llanilmoqda [5].

Polimerlar asosida gibrid materiallar yaratishda matritsaning tabiati hal qiluvchi ahamiyat kasb etadi. Polivinilxlorid (PVX) — yuqori mexanik mustahkamlikka va kimyoviy barqarorlikka ega, sanoatda keng qo‘llaniladigan polimer bo‘lib, uni aminoguruh tutuvchi modifikatorlar bilan modifikatsiyalab so‘ng metall oksidlari kiritish orqali issiqlikka chidamlilik, sirt faolligi va elektr o‘tkazuvchanlik kabi xossalarini sezilarli darajada yaxshilash mumkin. Shu sababli PVX asosida yaratilgan funksional polimer nanokompozitlar antibakterial va fotokatalitik faol materiallar sifatida keng o‘rganilmoqda. Biroq ko‘pchilik ishlarda CuO zarrachalarining polimer matritsada taqsimlanish mexanizmi, zarracha o‘lchamining kristall struktura barqarorligiga ta’siri va ularning fazaviy holatini aniqlash yetarlicha yoritilmagan[6-7].

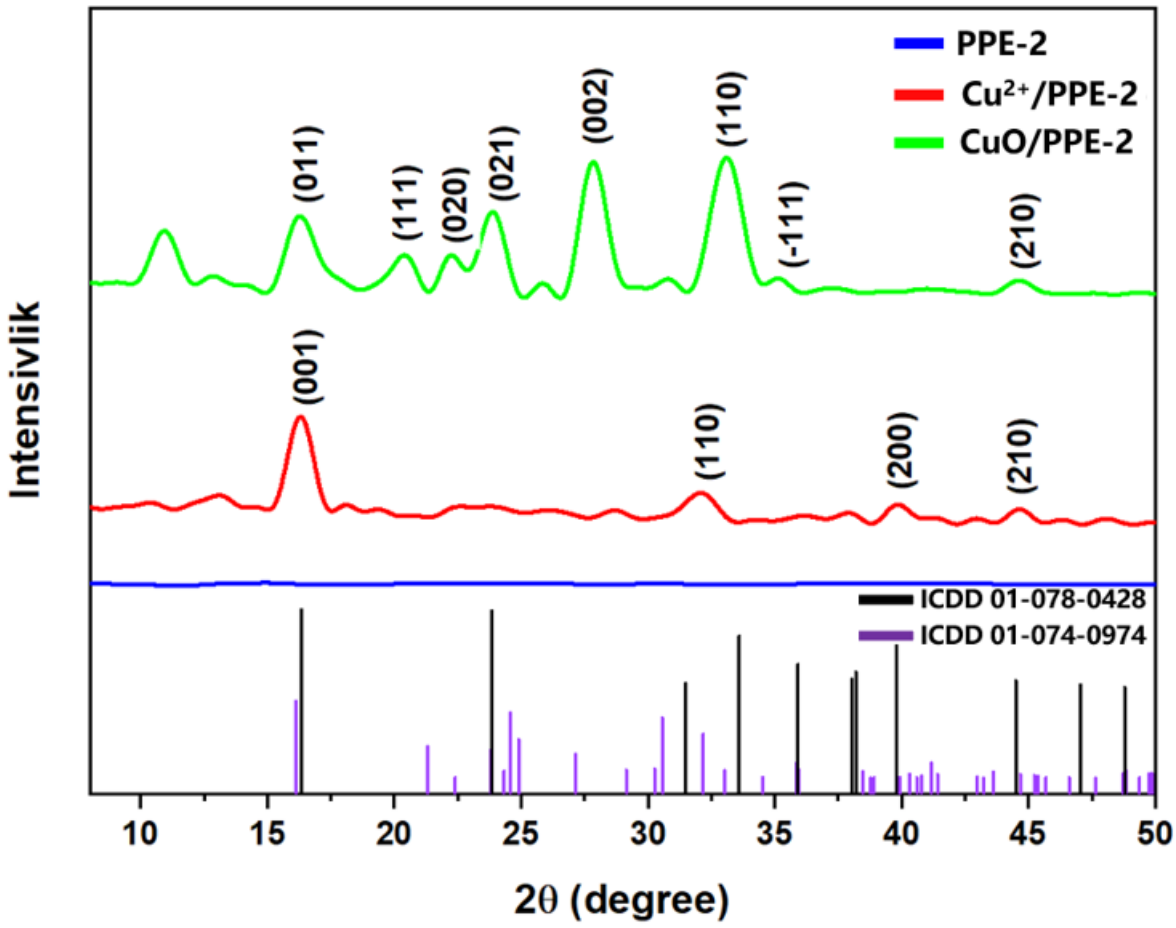
Bu borada Rentgen diffraksion tahlil (XRD) usuli eng samarali strukturaviy diagnostika usullaridan biri bo‘lib, u nanokompozitdagi kristall fazalarni aniqlash, zarracha o‘lchamini hisoblash hamda kristall panjara deformatsiyasini baholash imkonini beradi. Xususan, Debye–Scherrer va Williamson–Hall usullari yordamida CuO nanozarrachalarining kristallit diametri, deformatsiya darajasi va kristallanish foizi aniqlanadi. Bu parametrlar nanokompozitlarning issiqlikka va mexanik ta’sirlarga barqarorligi bilan bevosita bog‘liqdir[8-9].

Ushbu tadqiqotda PVX asosidagi ion almashinuvchi funksional polimer material-PPE-2 polimer matritsasi tanlandi, chunki u o‘z tarkibida amin va amid guruhlariga ega faol markazlarni saqlaydi. Ushbu markazlar Cu^{2+} ionlari bilan koordinatsion bog‘lanish hosil qilib, CuO nanozarrachalarining polimer matritsada barqaror fiksatsiyasini ta’minlaydi. Shu yo‘l bilan CuO/PPE-2 funksional nanokompoziti sintez qilindi va uning kristallik tuzilmasi rentgen diffraksion tahlil yordamida o‘rganildi.

NATIJALAR VA MUHOKAMA

CuO/PPE-2 funksional polimer nanokompozit materialining kristall tuzilishi, fazaviy tarkibi, nanozarrachalarning o‘lchami va polimer matritsasi bilan o‘zaro ta’sirini aniqlash uchun Rentgen Nurlarining Diffraksion analizi yordamida o‘rganildi. CuO nanozarrachalarining XRD analizi qadam kengligi 0.02° bo‘lgan 5° dan 90° gacha bo‘lgan Bragg burchagi sohasida 2 °/min skanerlash tezligida olib borildi. Quyidagi 1-

rasmda Xpert High Score da analiz qilingan PPE-2 va CuO/PPE-2 nanokompozit materialni difraktogrammasi keltirilgan bo‘lib, sintezdan oldingi va sintezdan keyingi PPE-2 ning XRD rentgennogrammalari taqqoslanganda sezilarli o‘zgarish kuzatilgan. Bu o‘zgarishlar PPE-2 ning mezo- va mikrog‘ovaklarida CuO zarrachalarining tarqalganligini ko‘rsatadi. Rentgen Nurlarining Diffraksion (XRD) analizida kuzatilgan o‘tkir diffraksiya cho‘qqilari anion almashinuvchi materialga sintez qilingan CuO nanozarrachalarining kristall tuzilishini tasdiqlaydi.



1-rasm. CuO/PPE-2 nanomaterialining XRD analiz rentgennogrammasi

PPE-2 yuzasida sintez qilingan CuO nanozarrachalarini kristallit o‘lchami taxminan 32,3 nm, kristallanish darajasi esa 77 % ekanligi hisoblab topildi. Olingan CuO nanokompozit materialning rentgen diffraksiya cho‘qqilari 01-078-0428 shifrli ICDD bazasi bilan to‘liq mos keldi. Nanozarracha kristallit o‘lchamini hisoblashda Debye-Scherrer tenglamasi va Williamson-Hall usullaridan foydalanildi.

Debye-Scherrer usuli.

CuO/PPE-2 nanozarrachalarining o‘rtacha kristallit o‘lchami Debye-Scherrer tenglamasi yordamida hisoblandi:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta_{hkl} Cos\theta} \qquad (1)$$

Bu yerda λ = 1.5406Å, **θ – Bragg diffraksion burchagi, β – radiandagi yarim maksimumdagi to‘liq kenglik (FWHM), K = 0.94 Scherrer konstantasi sifatida qo‘llanilgan (jadval-1).**

1-jadval

CuO/PPE-2 funksional nanomaterialning o‘rtacha kristallit o‘lchami

Peak position 2θ (°)	FWHM β (°)	Kristalit o‘chami D (nm)
10,94839	0,31584	26,39
16,17859	0,2857	29,33
17,29199	0,2482	33,81
20,26219	0,25117	33,56
22,37269	0,25242	33,51
23,85787	0,25713	32,98
27,7942	0,30625	27,91
32,66214	0,2838	30,47
33,3882	0,311	27,85
34,96062	0,21853	39,81
44,60777	0,22621	39,65
O‘rtacha kristallit o‘lchami		32.30

Williamson-Hall usuli.

CuO nanozarrachalarini kristallit o‘lchami va panjara deformatsiyasi Williamson-Hall usuli yordamida hisoblandi. Bu usulda Scherrer tenglamasidan farqli ravishda cho‘qqilar kengayishiga kristallit hajmi va panjara deformatsiyasi alohida ta’sir ko‘rsatishi hisobga olinadi:

$$\beta_T = \beta_D + \beta\,\varepsilon \qquad (2)$$

Bu yerda β_T – umumiy cho‘qqi kengayishi, β_D – kristallit o‘lchami tufayli kengayish va β_ε – panjara deformatsiyasi tufayli kengayish.

Scherrer tenglamasidan ma’lumki,

$$D = \frac{K\lambda}{\beta_D \sin\theta}$$

yoki

$$\beta_D = \frac{K\lambda}{D \sin\theta} \qquad (3)$$

Bu yerda β_D – radiandagi yarim maksimumdagi to‘liq kenglik (FWHM), K = 0.94 – Scherrer konstantasi, λ = 0.15406 nm rentgen nuri to‘lqin uzunligi, D – kristallit o‘lchami va θ – radiandagi cho‘qqi joylashuvi.

Shunga o‘xshash rentgen diffraksiya cho‘qqisining mikrodefformatsiyasi tufayli kengayishi quyidagicha topiladi:

$$\beta\varepsilon = 4\varepsilon \tan\theta \qquad (4)$$

Bu yerda βε – deformatsiya tufayli cho‘qqining kengayishi, ε - panjara deformatsiyasi va θ – radiandagi cho‘qqi joylashuvi.

Yuqoridagi (3) va (4) tenglamalarni (2) tenglamaga qo‘ysak quyidagi tenglama hosil bo‘ladi:

$$\beta_T = \frac{K\lambda}{D\sin\theta} + 4\varepsilon\tan\theta \qquad (5)$$

$\tan\theta = \frac{\sin\theta}{\cos\theta}$ ekanligini hisobga olsak tenglama quyidagi ko‘rinishga keladi:

$$\beta_T \cos\theta = \varepsilon(4\sin\theta) + \frac{K\lambda}{D} \qquad (6)$$

Ushbu (6) tenglama to‘g‘ri chiziqli tenglama(y=ax+b)ni ifodalaydi. Bunda ε – to‘g‘ri chiziq qiyaligi **a** va $\frac{K\lambda}{D}$ – **y** o‘qi kesishmasi **b** ni beradi. Ya’ni biz x-o‘qiga $(4\sin\theta)$ va y-o‘qiga $(\beta_T\cos\theta)$ qiymatlarini qo‘yib to‘g‘ri chiziq chizgan holatda kristallit hajmini topishimiz mumkin. Buning uchun bizga quyidagi 2-jadvaldagi ma’lumotlar kerak bo‘ladi.

2-jadval

W-H chizmasi uchun hisoblangan qiymatlar

No.	2θ (degree)	FWHM (β_T) in degree	$\beta_T\cos\theta$	$4\sin\theta$
1	10,94839	0,31584	0,00549	0,38159
2	16,17859	0,2857	0,00494	0,56287
3	17,29199	0,2482	0,00428	0,60132
4	20,26219	0,25117	0,00432	0,7036

5	22,37269	0,25242	0,00432	0,776
6	23,85787	0,25713	0,00439	0,82679
7	27,7942	0,30625	0,00519	0,96072
8	32,66214	0,2838	0,00475	1,12475
9	33,3882	0,311	0,0052	1,14905
10	34,96062	0,21853	0,00364	1,20151
11	44,60777	0,22621	0,00365	1,51808

Hisoblash natijasiga ko‘ra defformatsiya qiymati $\varepsilon \approx 0.0003$ va kristallit hajmi $D \approx 32.30$ nm topildi, bu Debye-Scherrer usuli bilan mos keladi.

Kristal panjara parametrlari

CuO nanozarrachalar uchun kristal panjara parametrlari (a, b, c va β) quyidagi tenglama orqali hisoblandi:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac}\right)$$

Kristal panjara interplanar masofaga bog‘liq konstantalari va Miller ko‘rsatkichlari (h, k, l) Bragg tenglamasi orqali hisoblandi:

$$d = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$$

Natijalar quyidagi 3-jadvalda keltirilgan.

3-jadval

Hisoblablangan Interplanar masofa va Miller ko‘rsatkichlari qiymatlari

№	Cho‘qqi joylashuvi 2θ°	Interplanar masofa d (Å)	Miller ko‘rsatkichlari (hkl)
1	32.66214	2.73946	110
2	33.3882	2.68153	111
3	34.96062	2.56444	112
4	44.60777	2.02967	210

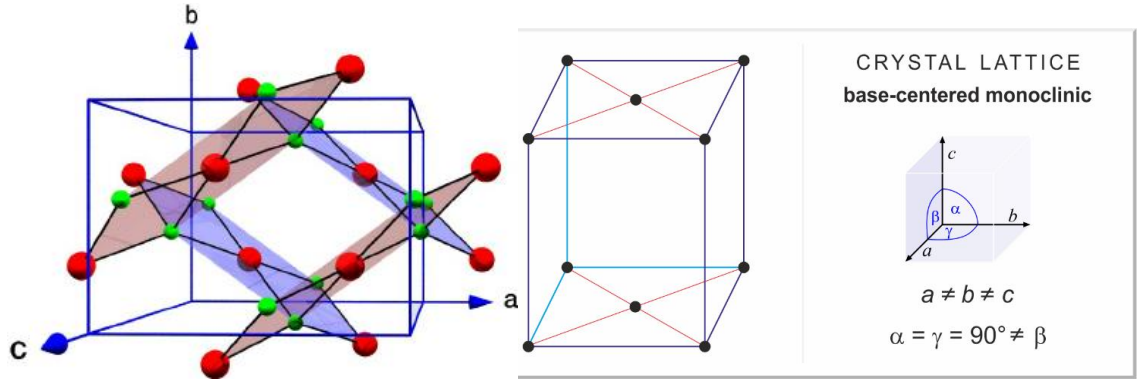
4-jadval

CuO/PPE-2 kristal panjara parametrlari

Panjara parametrlari	Standart qiymatlar (Å)	Hisoblangan qiymatlar (Å)
a	4.684	4.68
b	3.422	3.42
c	5.129	5.13

Panjara parametrlari	Standart qiymatlar (Å)	Hisoblangan qiymatlar (Å)
β (°)	99.54	99.54

Kristall panjara parametrlari CuO nanozarrachalari kristallari monoklinik tuzilishga ega bo‘lib, 01-078-0428 shifrli ICDD standartiga mos keladi (2**Ошибка! Источник ссылки не найден.**-rasm).



2-rasm. CuO ning monoklinik kristal panjarasi tuzilishi

XULOSA

O‘tkazilgan rentgen diffraksion tahlil natijalari shuni ko‘rsatdiki, PPE-2 polimer matritsasiga kiritilgan mis(II) oksidi nanozarrachalari monoklinik CuO (tenorit) fazasiga xos bo‘lgan aniq difraksion cho‘qqilarni hosil qiladi. Difraktogrammalar intensivligining pasayishi va cho‘qqilarning kengayishi nanozarrachalarning nanokristallit holatda shakllanganini, shuningdek ularning polimer matritsa bo‘ylab bir tekis taqsimlanganini tasdiqlaydi. Debye–Scherrer usuli bilan aniqlangan o‘rtacha kristallit o‘lchami 32.3 nm oralig‘ida bo‘lib, bu CuO nanozarrachalari uchun xos bo‘lgan kuchsiz kristallanmagan (qisman amorf) strukturaning shakllanganini ko‘rsatadi.

XRD tahlili natijalari PPE-2 polimeri CuO zarrachalarini matritsa ichida barqarorlashtirib turuvchi o‘zaro kordinatsion bog‘lanishlar, elektrostatik hamda Van der Waals kuchlari orqali mustahkam bog‘langanligini tasdiqlaydi. Bu esa nanokompozitning strukturaviy barqarorligini oshiradi va zarrachalarning agregatlanishining oldini oladi. Shuningdek, CuO/PPE-2 nanokompozitining yetarli kristallanish darajasi uning issiqlikka chidamlilik, optik va fotokatalitik xossalarining yanada yaxshilanishiga zamin yaratadi.

Shunday qilib, olib borilgan tadqiqotlar CuO/PPE-2 nanokompoziti barqaror kristall tuzilishga ega bo‘lib, sensor materiallar, antibakterial qoplamalar va fotokataliz jarayonlarida qo‘llash uchun funksional imkoniyatini kengaytiradi.

ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. M. E. Grigore, E. R. Biscu, A. M. Holban, M. C. Gestal, and A. M. Grumezescu, ‘Methods of Synthesis, Properties and Biomedical Applications of CuO Nanoparticles’, Pharmaceuticals, vol. 9, no. 4, p. 75, Dec. 2016, doi: 10.3390/ph9040075.
2. Tazim T.Q. et al., Hydrothermal synthesis of nano-metal oxides for structural modification: A review // Nanotechnol. 2025. T. 7. C. 100167.
3. A. B. G. Trabelsi et al., ‘Effect of CuO Nanoparticles on the Optical, Structural, and Electrical Properties in the PMMA/PVDF Nanocomposite’, Micromachines, vol. 14, no. 6, Art. no. 6, June 2023, doi: 10.3390/mi14061195.
4. Y. Ahmadian, A. Bakravi, H. Hashemi, and H. Namazi, ‘Synthesis of polyvinyl alcohol/CuO nanocomposite hydrogel and its application as drug delivery agent’, Polym. Bull., vol. 76, no. 4, pp. 1967–1983, Apr. 2019, doi: 10.1007/s00289-018-2477-9.
5. Qureshi Z.A. et al., Carbon dots as versatile nanomaterials in sensing and imaging: Efficiency and beyond // Heliyon. 2024. T. 10, № 11. C. e31634.
6. Yoon Y. et al., Metal-Oxide Nanomaterials Synthesis and Applications in Flexible and Wearable Sensors // ACS Nanosci. Au. American Chemical Society, 2022. T. 2, № 2. C. 64–92.
7. Dörner L. et al., Cost-effective sol-gel synthesis of porous CuO nanoparticle aggregates with tunable specific surface area // Sci. Rep. Nature Publishing Group, 2019. T. 9, № 1. C. 11758.
8. HAJIBEYGI M., GHASEMI A. A hindered phenol containing PVC/CuO nanocomposites; study on the mechanical and thermooxidative properties // Turk. J. Chem. T. 49, № 1. C. 29–44.
9. Gupta, Sonali & K., Keerthan & Laxman Kudipady, Manas & Puttaiahgowda, Yashoda. (2024). Antibacterial Effect of Copper Oxide Nanoparticles on Polyvinyl Chloride-Based Polymer Nanocomposite. Advances in Polymer Technology. 2024. 10.1155/2024/5527195.