

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.К/ФМ/Т.36.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ
АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
АНДИЖОН МАШИНАСОЗЛИК ИНСТИТУТИ**

АСКАРОВ БАХОДИРЖОН

**ВИБРОН ТУШУНЧАЛАРИ АСОСИДА ПОЛИМЕР
НАНОТИЗИМЛАРДА ЮЗАГА КЕЛУВЧИ ЎЗ-ЎЗИНИ
ТАШКИЛЛАШТИРИШ ЖАРАЁНЛАРИНИ СИНЕРГЕТИК
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.06 – полимерлар физикаси
02.00.12 – нанокимё, нанофизика ва нанотехнология
(физика-математика фанлари)**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2021

Докторлик (Doctor of Science) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата докторской (Doctor of Science) диссертации

Contents of the thesis of doctoral (Doctor of Science) dissertation

Аскарлов Баходиржон

Виброн тушунчалари асосида нанополимер тизимларда юзага келувчи ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини синергетик моделлаштириш..... 3

Аскарлов Баходиржон

Синергетическое моделирование процессов самоорганизации в полимерных наносистемах на основе вибронных представлений..... 27

Asqarov Bahodirjon

Synergetic modeling of self-organization processes in polymer systems on the base of the vibronical conceptions..... 51

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works..... 54

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.К/ФМ/Т.36.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

**ПОЛИМЕРЛАР КИМЁСИ ВА ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ
АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
АНДИЖОН МАШИНАСОЗЛИК ИНСТИТУТИ**

АСКАРОВ БАХОДИРЖОН

**ВИБРОН ТУШУНЧАЛАРИ АСОСИДА ПОЛИМЕР
НАНОТИЗИМЛАРДА ЮЗАГА КЕЛУВЧИ ЎЗ-ЎЗИНИ
ТАШКИЛЛАШТИРИШ ЖАРАЁНЛАРИНИ СИНЕРГЕТИК
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

**01.04.06 – полимерлар физикаси
02.00.12 – нанокимё, нанофизика ва нанотехнология
(физика-математика фанлари)**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2021

Фан доктори (DSc) диссертацияси манзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси хузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2021.І.DSc/FM173 рақами билан рўйхатга олинган

Докторлик диссертацияси Полимерлар кимёси ва физикаси институти, Андижон давлат университети ва Андижон машинасозлик институтларида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (Ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (polchemphys.uz) ва «ZiyoNet» ахборот-таълим порталида (www.ziyo.net.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслаҳатчилар :

Рашидова Сайёра Шарафовна
Кимё фанлари доктори, профессор, академик

Оксенгендлер Борис Леопольдович
физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар :

Мамадалимов Абдугафур Тешабоевич
физика-математика фанлари доктори, академик

Матрасулов Даврон Урунович
физика-математика фанлари доктори, профессор

Нечипоренко Юрий Дмитриевич
физика-математика фанлари доктори, профессор

Етакчи ташкилот:

Тошкент давлат техника университети

Диссертация химояси Полимерлар кимёси ва физикаси институти хузуридаги DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 рақамли Илмий кенгашнинг «5» НОЯБРА 2021 й. 14⁰⁰ даги мажлисида бўлиб ўтди. (Манзил: 100128, Тошкент шаҳри, Абдулла Қодирий кўчаси, бино 7^б. Тел.: (+99871)241-85-94, факс. (+99871) 241-26-60, e-mail: polymer@academy.uz.)

Диссертация билан Полимерлар кимёси ва физикаси институти Ахборот-ресурс марказида таништириш мумкин (№ 25 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100128, Тошкент шаҳри, Абдулла Қодирий кўчаси, бино 7^б. Тел.: (998-71)-241-85-94).

Диссертация автореферати 2021 йил «22» 10 кунги тарқатилди.
(2021 йил «22» 10 даги № 2 рақамли реестр баённомаси).



Н.Р. Ашуров
Илмий даражалар берувчи бир марталик
илмий кенгаш раиси, т.ф.д., профессор

М.М. Усмонова
Илмий даражалар берувчи бир
марталлик илмий кенгаш котиби,
к.ф.н., катта илмий ходим

С.С. Негматов
Илмий даражалар берувчи бир марталик
илмий кенгаш семинар
раиси, т.ф.д., академик

КИРИШ (фан доктори (DSc) диссертациясининг аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Бугунги кунда нанообъектларнинг ўзига хос мураккаб тузилишлари туфайли вужудга келган ноёб хоссаларини ўрганишга алоҳида эътибор берилмоқда. Мураккаб нанотизимлардаги ўзгаришларнинг умумий қонуниятларини тадқиқ этишнинг муҳим вазифаларидан бири полимер нанотизимларидаги ўз-ўзини ташкил этиш жараёнларини синергетик моделлаштиришдир. Мувозанат ҳолатидан узоқда бўлган мураккаб объектларни ўрганишнинг янги усулларини ишлаб чиқиш полимерлар физикасининг долзарб вазифаларидан ҳисобланади.

Жаҳонда наноўлчамдаги объектларни, шу жумладан, энг мураккаб жонли тизимларни тадқиқ этишга термодинамика ва ночизиқли динамика усуллари ёрдамида уларнинг электрон тузилиши ва атом жараёнларини ўрганиш асосида ёндошилмоқда. Ҳозирда полимер нанотизимлардаги каталитик жараён тадқиқотлари туфайли бевосита полимеризация пайтида полимер нанокомпозитларни синтез қилишга эришилган ва бундай жараёнлар синергетика, фрактал анализ, қайтмас агрегацияланиш моделлари, аномал диффузия концепцияси каби замонавий физикавий концепциялар асосида ифодаланган. Бу борада нанообъектларнинг атом ва электрон тизимларини ифодалаш ва бошқариш, кимёвий реакцияларнинг механизмларини тадқиқ этиш, полимер нанотизимларга виброн назариясини қўллаш, нанокатализнинг кимёвий кинетикаси, нанообъектларнинг ўсиш ва ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини, жумладан жонли тизимлардаги, қатор масалаларни ечиш муҳим аҳамият касб этади.

Республикамизда махсус физикавий, кимёвий ва биологик хоссаларга эга бўлган материаллар, наноқурилмалар ва наноструктураларни яратиш, шунингдек, алоҳида атом, молекула, молекуляр тизимларни бошқаришга эришиш учун нанометр ўлчамдаги фазода юз берувчи, физикавий-кимёвий жараёнларнинг қонуниятларини ўрганишга катта эътибор берилиб, фан ва таълимни ривожлантириш, ҳамда фундаментал тадқиқот натижаларини амалиётга жорий этиш борасида муҳим натижаларга эришилмоқда. Илм-фан ва таълимни интеграциясида, назарий билимларни амалиёт билан боғлаш масалаларини ҳал этишда синергетика принциплари муҳим ҳисобланади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида”ги фармони, 2021 йил 19 мартдаги ПҚ-5032-сонли “Физика соҳасидаги таълим сифатини ошириш ва илмий тадқиқотларни ривожлантириш чора-тадбирлари тўғрисида”ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг Республика фан ва техника тараққиётининг устувор йўналишларига боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти VII. “Кимёвий технологиялар ва нанотехнологиялар” дастури доирасида Ўзбекистон

Республикаси фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мувофиқ тарзда амалга оширилди.

Диссертация мавзусига оид хорижий илмий тадқиқотларнинг шархи. Электрон структура, нанообъектлар иштирокидаги кимёвий реакцияларнинг механизмлари, жумладан полимер нанотизимлар билан, нанокатализ кимёвий кинетикаси, ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнлари ва нанообъектларни ўстириш билан қатор етакчи илмий-тадқиқот марказлари ва олий-таълим муассасалари; жумладан Штутгарт университети, Мартин-Лютер университети, Фридрих-Александр университети, Эрланген-Нюрнберг университети (Германия), Флорида халқаро университети, Калифорния университети, Аризона давлат университети (АҚШ), Брюссел Озодлик университети (Бельгия), Ульянов давлат аграр университети, В.А. Стеклов номидаги Математика институти, Амалий математика институти (Россия) томонидан олиб борилмоқда.

Фан ва техниканинг турли соҳаларида синергетика усуллари қўллашга оид жаҳонда олиб борилган илмий тадқиқотлар натижасида қатор, жумладан қуйидаги илмий натижалар олинган: табиий ва ижтимоий тизимларда ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнлари тадқиқ этилган (Штутгарт университетининг Назарий физика институти ҳузуридаги Синергетика маркази, Германия), биополимер структуралардаги ўз-ўзидан йиғилиш жараёнлари ўрганилган (Франция давлат университети, Франция), ўз-ўзидан йиғилиш жараёнини ифодалашнинг умумий тамойилларига назарий ёндашувлар таклиф этилган, конденсат ҳолатидаги номувозанат квант нанотизимларидаги ўз-ўзини ташкиллаштириш ўрганилган (Кимё ва кимё-доришунослик технологиялари институти, Россия), номувозанат термодинамик тизимларда маълум шароитда модда ва энергияни ташқи муҳитдан ютиб, мураккабланиш сари кескин сакраб ўтиши кўрсатилган (Брюссел университети, Бельгия), ютувчи ва чиқарувчи элементлардан ташкил топган тизимларни ифодаловчи ночизиклик параболик тенгламалар ечимларининг кенг синфи таҳлил этилган ва янги усуллари ривожлантирилган, реакция-диффузия тизимларида диффузияланган хаос ва мураккаб тартибланиш таҳлил этилган (Москва давлат университети, Россия), синергетикавий жараёнларни ифодалаш учун ҳалокатлар назарияси номи билан танилган математик аппарат ишлаб чиқилган (Сорбонна университети гуруҳи, Франция), динамик хаос ва мураккаблик муаммоси, фрактал геометрия ва фракталлар назарияси ривожлантирилган (Калифорния технология институти, АҚШ), ўзига ўхшаш объектлар геометрияси асосида динамик хаос структуралари ифодаланган, кўринишини саклаш ва таниш давомида ахборотни самарали зичлаштириш имконияти очилган, (Париж университети, Франция), ночизиклик усуллар ёрдамида олиш, йиғиш, узатиш, барқарорлик, реакция фаоллиги ўрганилган, шунингдек нанозаррачалардан тузилган материалларнинг хоссалари тадқиқ этилган (Миллий илм жамғармаси, АҚШ).

Дунёда ночизик динамика, ўз-ўзини ташкилантириш, синергетика бўйича куйидаги қатор устувор йўналишларда тадқиқотлар кўплаб олиб борилмоқда, жумладан: синергетиканинг математик аппарати назарий физиканинг турли соҳаларини ўз ичига олган ночизикли ва номувозанат термодинамика; ҳалокатлар назарияси; гуруҳлар назарияси; тензорлар таҳлили; дифференциал топологияни ўрганиш.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Очик тизимлардаги номувозанат жараёнлар, қайтмас жараёнлар, тизим ҳолатларидаги флуктуациялар (тартибсиз оғишлар) ва энергия диссипацияси (сочилиши), қайтмас жараёнлар термодинамикаси, ўз-ўзини ташкилантирувчи тизимлар ва қурилмалардаги нотурғунликларнинг иерархияси кўп олимлар томонидан ўрганилмоқда, жумладан, бельгиялик (И. Пригожин ва бошқлар), германиялик (Х. Хакен), америкалик (М.Фейгенбаум), россиялик (С.П. Курдюмов). Бироқ ушбу тадқиқотлар полимер тизимларни ва улар асосидаги нанотизимларни ўрганишга қўлланилмаган.

Ночизик жараёнлар синергетикасини, динамик тизимлар ва динамик хаос назарияларини, суюқликлар механикасини жаҳон олимлари Х. Бенард (Франция), Р.М. Мэй, Х. Холдейн, В. Волterra, А. Тюринг, А. Лодка, Ж. Ньюманн, (Буюк Британия), Э. Лоренц (АҚШ), Ф. Такенс (Голландия), Д. Рюэл (Бельгия), Ф. Шлёлл (Германия) томонидан ўрганилган. Бироқ, ҳозирга қадар, наноструктуралардаги фракталлик ва ўлчам билан боғлиқ бўлган омиллар, ҳамда нанокатализ ва нанозаррачаларни ўсиш жараёнларини кўрсатувчи назария яратилмаган.

Синергетикавий ёндашув асосида ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини янги тури – динамик хаос, статистик физика ва динамик тизимлар назарияси асосида америкалик (М. Фейгенбаум, Ж. Биркхоф, франциялик (Й. Помо, П. Манневилле), россиялик (Л. Каданов, П. Берже, Г. Малинецкий, А. Потапов, А. Подлазов) олимлар томонидан ўрганилган. Кимёвий реакциялар координатасини аниқлашда виброн концепциясини қўллаш масаласи бугунги кунда ечилмаган бўлиб, полимерлар иштирокидаги кимёвий реакцияларда нотурғунлик ва ўлчам эффектлари ўрганилмаган. Ночизик тизимларда ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини вужудга келиши ифодаланган, мураккаб квант объектларда ночизик ҳодисалар, синергетикавий объектларни фрактал хоссалари, нанополимер тизимларнинг синергетикавий хоссалари, нанозаррача сиртининг реакцияга мойиллигининг виброн жихатлари ўрганилган. Полимер агропрепаратлар ва улар асосида тайёрланган нанотизим билан қопланган пахта уруғини униб чиқишидаги динамик жараёнларни ўрганиш учун синергетика усулидан фойдаланилган.

Жаҳон миқёсида, тиббиётда, электроника ва қишлоқ хўжалигида хаос назариясидан, корреляция ўлчови ғоясидан ва аломат аттрактор фрактал ўлчамларини ўлчаш, кимёвий реакцияларнинг бошқариш схемаларини ишлаб чиқиш устидаги тадқиқотлар кўпчилик олимлар томонидан, шунингдек, ўзбекистонлик олимлар (С. Рашидова, Б. Оксенгендлер, Н. Тураева) томонидан “Реагент+Маҳсулот” тизимининг бифуркация тўпламини

аниқлаш ўрганилган. Шу билан бирга ўзида нанокластерлар сиртида юз берувчи жараёнлар ва полимерланишнинг автокаталитик босқичини аниқлаш, нанозаррачаларнинг сирт электронлари ҳолатларининг ундаги жараёнларга таъсири ва номувозанат шароитда нанозаррачаларнинг ўсишини ўрганишда Кюри-Пригожин принциpidан оғиш, яъни номувозанатлик эффекиддан фойдаланилмаган.

Диссертация мавзусининг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари билан боғлиқлиги. Диссертация Полимерлар кимёси ва физикаси институти илмий тадқиқот ишлари режаларининг ФА-Ф7-Т-008 “Нанополимер тизимларининг биологик фаол хоссаларини табиий полисахаридларни синтези ва модификацияси билан ўзаро боғлиқлиги”; ФА-Ф-3-Т 100: “Полимерлардаги наноструктуралар, ҳосил бўлиш усуллари ва полисахаридларнинг ўзига хос хусусиятларида намоён бўлиш шакллари” лойиҳалари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади полимер нанотизимларнинг электрон-ион структурасидаги ўз-ўзини ташкил этиш жараёнларини синергетикавий моделлаштириш усулини ишлаб чиқиш ва полимер нанотизим хоссаларини ўрганишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

макромолекуланинг чегараланган атомлар гуруҳи (ЧАГ) виброн нотурғунликларини ўрганиш учун асосий моделни ишлаб чиқиш;

макромолекуланинг ЧАГ виброн нотурғунлик ва кимёвий реакциянинг ночизик кинетикаси ўртасидаги боғланишни ўрганиш;

полимер нанотузилманинг электрон-ион тизимидаги номувозанат ҳолатларда атомларнинг қайта жойлашув жараёнларини аниқлаш;

нанозаррача сиртида юз берувчи димер диссоцияси, дезацетилланиш реакцияси ва катенан халқаларига ажралиши элементар босқичларининг бошқариш параметрларини аниқлаш ва синергетик моделлаштириш;

полимер нанотизимларнинг баъзи хоссаларига, нанозаррача сиртида жойлашган электронлар таъсирини ўрганиш;

ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларининг автокаталитик жараёнига электронлар таъсирини (U – манфийлик) ўрганиш;

полимер нанотузилмаларга уларнинг ўлчови ва ўлчами билан боғлиқ таъсирларни тадқиқ этиш асосида синергетика усул ва моделларини қўлланилиш соҳаларини кенгайтириш.

Тадқиқот объекти сифатида макромолекуланинг электрон-ион тизими олинган. Объектнинг асосий параметрлари ўлчов, ўлчам (шу жумладан фрактал ўлчов) ва электрон-тебраниш катталиклари олинган.

Тадқиқот предмети нанополимер тизимларидаги электрон-ион жараёнлар; макромолекулани электрон-ион тизимидаги номувозанат ҳолатларида наномасштабдаги тузилмаларни шаклланиш жараёнлари; макромолекула ЧАГ идаги виброн эффекилари; нанозаррачаларни ўсиш жараёнларида номувозанатлик билан боғлиқ эффекилар ва макромолекуляр тизимлардаги дисперсланиш жараёнларидан иборат.

Тадқиқот усуллари. Наномикёсдаги макромолекуляр тизимларда электрон-ион структурада юз берувчи ўз-ўзини ташкил қилиш жараёнларини ўрганишда синергетика усулларида фойдаланилди. ЧАГнинг электрон структураси квант кимё усулларида, кўп таркибли ночизикли кимёвий кинетикага оид тенгламалар Гир усули асосида тайёрланган “PLASER” дастурий таъминотидан, динамик тизимда юз берувчи бифуркациялар Том-Арнольд усулидан иборат.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги куйидагилардан иборат:

илк бор полимер нанотизимлардаги ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини ўрганиш учун макромолекуланинг чегараланган атом гуруҳлари (ЧАГ) тушунчаси киритилган;

илк бор ЧАГда юз берувчи бифуркациялар ва кимёвий кинетика стационар ҳолатларида юз берувчи нотурғунлигикларни тадқиқ этишнинг топологик моделлари тузилган;

илк бор полимер нанотизимлардаги автокаталитик жараён билан электрон-ион структура ўртасидаги U-манфий боғланиш аниқланган;

нанообъектларда Кюри-Пригожин принципини бузилиш мезони аниқланган;

полимер нанотизимлардаги электрон-ион жараёнларига сирт электрон ҳолатларининг таъсири аниқланган;

илк бор макромолекулалардаги ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини ўрганишга эркин валентлик, виброн нотурғунлик ва симметрияни пасайтирувчи тушунчалардан фойдаланилган;

илк бор макромолекула чегараланган атом гуруҳлари виброн нотурғунлиги ва ночизик кинетика ўртасидаги ўзаро алоқани таҳлил этиш асосида полимер нанотизимларда ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларининг моделлаштириш алгоритми яратилган;

нанозаррача сиртида димернинг диссоцияланиш жараёнида N-ацетилглюкозаминнинг дезацетилланиш реакцияси ва катенан ҳалқалари ажралиш реакцияларининг элементар босқичлари аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари куйидагилардан иборат:

юрак ишемик касаллигини ташҳис қилиш учун инсон нафаси таркибида мавжуд биоген аминларни аниқлаш усули ишлаб чиқилган;

атеросклерознинг ривожланиш жараёнида липидлар ва углеводлар алмашинувидаги ўзгаришларнинг аҳамияти аниқланган;

оксидланиш – қайтарилиш реакцияларида автокаталитик босқични вужудга келиш шартлари топилган;

тиббиёт соҳасида кадрлар тайёрлашда синергетика усуллари асосида интерфаол ўқитишни ташкил этишга бағишланган ўқув – услубий қўлланма амалиётга татбиқ этилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилигини виброн моделлар ва кинетик схемалар асосида олинган натижалари тажрибада аниқланган маълумотлар билан сифат жиҳатидан мос келишувига эришилганлиги билан изоҳланади. Иккинчи томондан макромолекуланинг ЧАКига оид виброн

моделлар моҳиятан кимёвий реакцияларнинг Берсукер томонидан ишлаб чиқилган виброн концепциясига зид эмас, балки уни синергетиканинг тартиб параметри тушунчаси билан ривожлантиради ва у билан бошқарув параметрини носимметрик қисми мавжуд бўлмаганда тўла мос келади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти синергетика усуллари билан кимёвий реакциялар концепциясининг ўзаро интеграцияси ҳисобланиб, унинг асосида нанотизимларда атомларни қайта жойлашув жараёнларини ўрганиш имконини берувчи алгоритм ишлаб чиқилган. Виброн нотурғунлик мезонидан фойдаланиб, ушбу алгоритм макромолекулалардаги ЧАГидаги жараёнларни ўрганиш учун қўлланилади. Синергетик моделлаштиришнинг бошқарув параметрлари нанополимер тизимларнинг динамик хусусиятларини тавсифлаш имконини бергани сабабли тажриба ишларини режалаштиришда илмий-амалий аҳамиятга эгадир. Айниқса синергетикавий моделлаштириш усули ва кимёвий реакцияларнинг виброн концепцияси ёрдамида нанообъектлардаги атомларнинг қайта жойлашув жараёнларини ўрганиш имконини беради.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти синергетикавий моделлаштириш юрак-қон томир тизимидаги патологик ҳолатларни вужудга келишида илгари номаълум динамик механизмларни аниқлаш имконини берди. Артериал қон томирлари бўйлаб атеросклеротик тузилмаларни мужассамлаштириш ёки ёйиш оқибатлари, шунингдек диабет ва атеросклерознинг ўзаро таъсирининг янги синергетик хусусиятларини аниқлаш асосида одам касалликларини даволашнинг янги усуллари очиши билан катта амалий аҳамиятга эга ҳисобланади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Виброн тушунчалари асосида полимер нанотизимлардаги ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини синергетикавий моделлаштириш бўйича олинган илмий натижалар асосида:

полимер нанотизимлардаги автокаталитик жараён билан электрон-ион структура ўртасидаги U-манфий боғланиш, нанообъектларда Кюри-Пригожин принципини бузилиш мезони, полимер нанотизимлардаги электрон-ион жараёнларига сирт электрон ҳолатларининг таъсири ДН-22-2019 рақамли “Нометалл кристаллардаги наноструктуравий дефектларини ўзаро бир-бирига айланиш жараёнларини бошқаришнинг янги технологиялари” лойихасида синергетикавий моделлаштириш усули қўлланилган. (Ош давлат университетининг 2020 йил 4-декабрдаги 210-рақамли маълумотномаси). Натижада фрактал тузилмага эга бўлган нанотолаларни ноёб физикавий ва кимёвий хоссаларини бошқариш имконини берган;

макромолекула чегараланган атом гуруҳлари виброн нотурғунлиги ва ночизик кинетика ўртасидаги ўзаро алоқани ўрганиш алгоритми ССВ-Ф-037 рақамли “Овқат ҳазм қилиш безларининг функциялари бузилишининг патогенетик механизмларида протеазалар ва протеаза фаол жигар

рецепторлари ролини ўрганиш” фундаментал лойиҳада топоизомераза фаоллигига оид натижалар қўлланилган. (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2020 йил 16-ноябрдаги 89-03-4727 рақамли маълумотномаси). Натижада протеаза ва жигар рецепторлари функцияларидаги ўзгаришларни сифат жиҳатидан баҳолаш имконини берган; макромолекулалардаги ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини ўрганишнинг фойдали моделлари эркин валентлик, виброн нотурғунлик ва симметрияни пасайтирувчи тушунчалардан Ф2-ФА-Ф162 рақамли “Кўп атомли заррачаларнинг қаттиқ жисм сирти билан таъсирлашуви” фундаменталь лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Фанлар Академиясининг 2020 йил 4-декабрдаги 2/1255-2740 рақамли маълумотномаси). Натижада фрактал хоссага эга бўлган сиртда кўп атомли заррачаларни ионизацияланиш жараёнларини аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг синови. Диссертация ишининг асосий натижалари 9 та халқаро ҳамда 7 та Республика илмий-амалий анжуманларида муҳокамадан ўтказилган.

Илмий тадқиқот натижаларининг чоп этилганлиги. Диссертация мавзуси бўйича 33 та илмий ишлар нашр этилган, шулардан 17 таси Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этишга тавсия этилган хорижий нашрларда 3 та ва маҳаллий нашрларда 14 та мақолалар эълон қилинган. Бундан ташқари, 3 та интеллектуал мулкга доир хужжат (битта муаллифлик гувоҳномаси, иккита рационализаторлик таклифлари ва ночизиқли кинетикани моделлаштириш ва бифуркация параметрларини аниқлашнинг битта алгоритми яратилган) мавжуд.

Диссертациянинг тузилиши ва кўлами. Диссертация иши кириш, икки қисм, бешта боб, хулосалар, 72 та расм, 12 жадвал ва 180 фойдаланилган адабиётлар рўйхати, ҳамда битта иловадан иборат бўлиб, у 195 саҳифада ифодаланган.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида синергетиканинг фундаментал асосларини таҳлил қилиш ва фаннинг турли соҳаларида, шу жумладан биополимер фани ва тирик тизимлар соҳасидаги маълумотларни кўриб чиқиш асосида, диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурлиги асосланган ва муаммо аниқланган. Диссертация ишининг мақсади ва вазифалари қисқача ифодаланган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг ишончлилиги асосланган, уларнинг назарий ва амалий аҳамияти аниқланган, тадқиқот натижаларининг бажарилиши ва диссертация тузилиши тўғрисида маълумотлар берилган.

Диссертациянинг **“Синергетик моделлар ва усулларининг шарҳи”** номли биринчи бобида макромолекулада ўз-ўзини ташкил этиш жараёнларини ўрганиш учун синергетик усулларни таҳлил қилиш асосида иккита усул танланди: ҳалокатлар назарияси ва дискрет акс эттириш. Ушбу

икки усул муаммони ҳал этишга етарли эканлиги ва диссертация ишида кўриб чиқилган ночизик тизимларнинг асосий хусусиятларини сифат кўрсаткичларини аниқлаш учун етарли эканлиги кўрсатилган. Ҳалокатлар назариясининг усуллари физикавий-кимёвий тизимлардаги узлуксиз ва кескин тусда-узилиш билан юз берувчи ўз-ўзини ташкил этиш жараёнларини ўрганиш учун ишлатилган. Дискрет акс эттириш усуллари эса юрак ва ўпканинг ўзаро уйғун ишлаш кўрсаткичларини таҳлил қилиш асосида одамнинг соғ ва касал ҳолатларини ўрганиш учун қўлланилган.

Диссертациянинг **“Квазибирўлчамли нанотизимлардаги электрон-ион жараёнлар”** номли иккинчи бобида электрон конфайнмент ва нанозаррача сирт чегарасининг фрактал тузилишини ўрганишга алоҳида эътибор қаратилган. Нанотизимлар тузилишидаги бузилиш ва тартибланиш жараёнлари туфайли виброн таъсирини сифат жиҳатидан ўзгариши мумкинлиги кўрсатилган.

Нанокластерда ўз-ўзини ташкил этиш жараёлари хитозан мономерларининг бир-бирига нисбатан жойлашувининг тартибига қараб унинг биологик фаоллигини аниқлаш вазифаси сифатида шакллантирилган.

Виброн концепция асосида қайтмас жараёнларнинг микроскопик тавсифи берилган. Синергетиканинг асосий моделларини таҳлил қилиб, синергетикавий масалаларни ечишда мувозанат ҳолатларини ўрганувчи кимёвий кинетика тушунчаларининг чегараланганлиги кўрсатилган.

Кимёвий реакцияларни микроскопик таснифлаш усуллариининг қиёсий таҳлили ўтказилган. Молекуляр орбитал (МО) корреляцион диаграммалар усули уларни симметрия бўйича таснифлаш учун гуруҳли-назарий таҳлилинини талаб қилади. Мономолекуляр реакцияларни таҳлил қилишнинг Фукуи усули молекулани икки қисмга ажратади. Бўлинган қисмлардан бири юқори эгалланган молекуляр орбитал (ЮЭМО) ва бошқаси пастки бўш молекуляр орбитал (ПБМО) бўлиши керак. Бундай ҳолда, муаммо молекуланинг икки қисмга ажратишдаги ноаниқлик туфайли юзага келади. Триндл томонидан МОларнинг тугунлар сонини сақлаган ҳолда, максимал ўзаро туташган йўлни аниқлашнинг янада ривожланган усули ишлаб чиқилган.

Дюар таъсирлашувчи реагентлардан бирини кичик жой алмашинишида МО комплексларини таҳлил қилиш орқали бимолекуляр реакцияларни ўрганиш усулини ишлаб чиқди. Бундай ҳолда электрон ҳолатларининг ўзаро аралашини поляризация кучларини ва унинг натижасида кимёвий боғ пайдо бўлади. Бу ҳолда боғланиш энергияси (ε) ифодасини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\varepsilon = \varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0 + \langle \psi_{R_1 R_2}^0 | H | \psi_{R_1 R_2}^0 \rangle + \sum_k \frac{\langle \psi_{R_1 R_2}^0 | H | \psi_{R_1 R_2}^k \rangle}{\varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0 - \varepsilon_{\{R_1 R_2\}}^k} \quad (1)$$

Бу ифодада R_1 ва R_2 эркин реагентлар ва $\varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0$ уларнинг энергияси $\psi_{R_1 R_2}^0 \approx \psi_{R_1}^0 \psi_{R_2}^0$ - R_1 ва R_2 лардан иборат комплексларнинг асосий ҳолатини ифодаловчи тўлқин функциялари. Ушбу усул Q_R нинг кичик оралиғида

$\varepsilon(Q)$ ни аниқлашга ва реакциянинг дастлабки босқичида энергия жиҳатидан энг қулай йўналишни аниқлашга имкон беради, аммо ўтиш ҳолатида бу усул қийинчиликларга дуч келади. Ушбу қийинчиликни енгиш учун электрон-тебранишли ўзаро таъсирлашув тизимнинг тўла потенциал энергиясини – U аниқлашда ҳисобга олинади. Бундай ёндашув асосида кўзғолиш назариясининг иккинчи тартибида тебраниш турлари (мода) - Q фазосидаги потенциал энергия рельефи - $\varepsilon(Q)$ куйидаги шаклга эга бўлади:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \langle \psi_0 | \frac{\partial U}{\partial Q} | \psi_0 \rangle Q + \langle \psi_0 | \frac{\partial^2 U}{\partial Q^2} | \psi_0 \rangle \frac{Q^2}{2} + \sum_k \frac{|\langle \psi_0 | \frac{\partial U}{\partial Q} | \psi_k \rangle Q|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_k} \quad (2)$$

Эйринг томонидан ишлаб чиқилган ўтиш ҳолати назарияси ҳам кимёвий кинетикани ўрганишда жуда муҳим аҳамиятга эга. Ушбу назария муаммонинг динамик қисмини четлаб ўтади ва реакция пайтида ядроларнинг қайта жойлашувини классик механика асосида аниқлайди. Реагентлар фаоллаштирилган комплекс билан динамик мувозанатда бўлади: $T \leftrightarrow R_1 + R_2$ ва мувозанат доимийси куйидагича ифодаланади:

$$K_0 = \exp(\Delta S/k) \exp(-U/kT) \quad (3)$$

Бу ифодада ΔS реагент ва фаоллаштирилган комплекс ўртасидаги энтропия фарқидир.

Фаоллаштирилган комплекс - T ни парчаланиши қайтарилмас жараён сифатида қабул қилинади: $T \rightarrow R$. Реакция доимийси: $K_T = kT/h$; шунинг учун ўтиш ҳолати назариясида R ни P га айланиш тезлиги куйидагича аниқланади: $K = K_0 \cdot K_T$. Бирок, фаоллашув энергиясини ҳам, фаоллаштириш энтропиясини ҳам керакли аниқликда ҳисоблаб топиш қийин, бу эса ушбу ёндашувни кўллашни яна жиддий чеклайди.

Кимёвий реакцияларни ўрганишда бизнинг ёндашувимизга кўра, макромолекула чегараланган атомлар гуруҳларининг турғунлиги виброн тушунчалар асосида кўриб чиқилади. Макромолекула занжири бўйлаб жойлашган атомлар гуруҳининг турғунлигини бошқариш параметрларини аниқлаш учун Q реакция координатаси бўйлаб потенциал рельеф куйидаги шаклда ифодаланади:

$$W = \frac{U_0}{2} (1 + \cos(\frac{2\pi}{a} Q)) \quad (4)$$

Макромолекула таркибидаги кимёвий қисм ва чегараланган атомлар гуруҳи (ЧАГ) ўртасидаги ўзаро таъсирнинг потенциали куйидагича ифодаланади:

$$V = U_n (\frac{a}{Q})^n; n = 1, U_1 = -\frac{ze^2}{a} \quad (5)$$

Тўлиқ потенциал рельеф: $E = V + W$ га тенг бўлади. Шундай қилиб, $E(Q)$ ни Q_0 атрофида кичик силжишлар $X = Q - Q_0$ бўйича қаторга ёйиб куйидаги ифодага эга бўламиз:

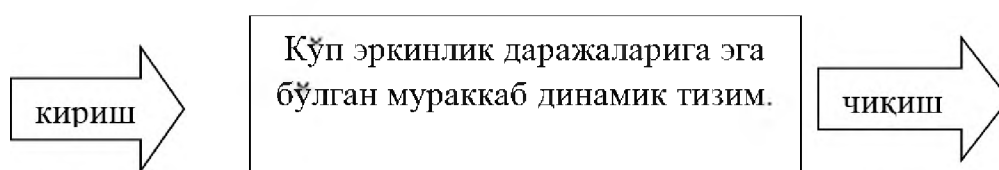
$$E = U_0 - \frac{U_0 \pi^2}{a^2} X^2 + \frac{U_0 \pi^4}{3a^4} X^4 + U_n \frac{a^n}{U_0^n} (1 - \frac{nX}{Q_0}) \quad (6)$$

$E(X)$ потенциалнинг экстремал нукталари куйидаги шарт $dE/dX = 0$ асосида аниқланади ва куйидаги кўринишга эга бўлади:

$$X^3 - \frac{3a^2}{2\pi^2}X - \frac{3na^{4+n}}{4U_0\pi^4Q_0^{n+1}} = 0; \quad u_1 = -\frac{3a^2}{2\pi^2}; \quad u_2 = -\frac{3na^{4+n}}{4U_0\pi^4Q_0^{n+1}}. \quad (7)$$

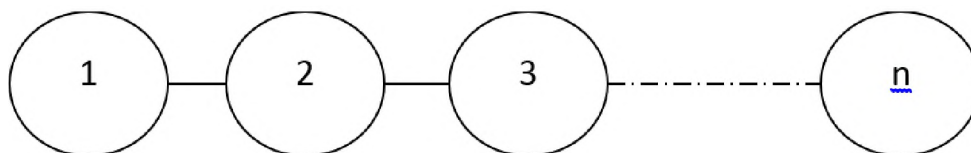
Ушбу муносабатларга кўра, потенциал рельефнинг иккита кўшни минимумлари ўртасидаги масофанинг ўзгармас қийматида фақат энергия тўсиғининг баландлиги кимёвий реагентларни ўзаро таъсирлашувини аниқлайди. Реакциянинг энергия тўсиғининг пасайиши назорат параметрининг мутлоқ қиймати - u_2 нинг ошишига олиб келади.

Диссертациянинг **“Квазибирўлчамли нанобъектларда электрон-ион жараёнларини синергетик моделлаштириш”** номли учинчи бобида виброн тушунчалар асосида нанобъектларни синергетик моделлаштириш усулининг асослари баён этилган. Макромолекуланинг қуйи атомар тизимидаги ўз-ўзини ташкил этиш жараёнлари фақат мувозанат ҳолатидан анча узокроқда шаклланади (1-расм).



1-расм. Номувозанат ҳолатини ушлаб туриш схемаси

Нанополимер тизимлари n -қисмдан иборат бўлган чизикли занжир сифатида кўриб чиқилади (2-расм). Квазибирўлчовлик тушунчаси, ҳар бир бўғиннинг ички тузилишга эга бўлишини аниқлатади, унинг турғунлиги бутун занжирнинг ҳолатига боғлиқдир.



2-расм. Макромолекуляр тузилишнинг квазибирзанжир схемаси

Бу ҳолда n -электрон учун энергия сатҳини қуйидаги формула бўйича ҳисоблаш мумкин (1-жадвал):

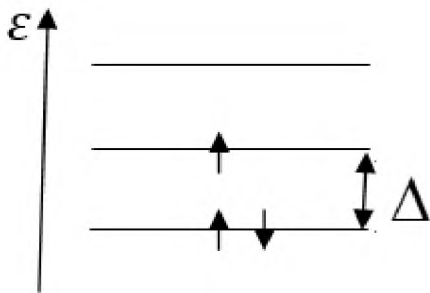
$$\varepsilon_k = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi k}{n+1}\right). \quad (8)$$

1-жадвал.

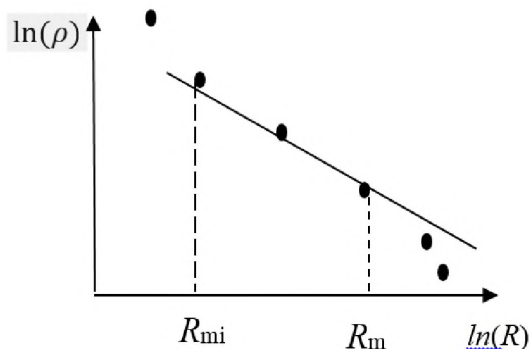
Чизикли занжир энергия сатҳлари

ε_k	$k=1$	$k=2$	$k=3$
$n=2$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \alpha + \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \alpha - \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\pi = \alpha - 2\beta$
$n=3$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \alpha + \sqrt{2}\beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = \alpha$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{3\pi}{4}\right) = \alpha - \sqrt{2}\beta$

ЮЭМО ва ПБМО ўртасидаги энергия фарқи ва энергия сатҳларининг диаграммаси 3-расмда кўрсатилган.



3-расм. ЮЭМО ва ПБМО ўртасидаги энергия тирқиши



4-расм. Нанополимер тизими зичлигини макромолекула ўлчамига боғлиқлиги

ЮЭМО ва ПБМО нинг тенг миқдордаги ва тоқ сонли электронлар учун энергия сатҳи орасидаги энергия фарқи қуйидаги формулалар ёрдамида аниқланади:

$$\Delta_g(n) = -4\beta \sin\left(\frac{\pi}{2n+1}\right); \quad \Delta_u(n) = -2\beta \sin\left(\frac{\pi}{n+1}\right); \quad (9)$$

Макромолекула атомларининг иккита асосий маҳаллий гуруҳлари учун мос келадиган қийматлар 2-жадвалда келтирилган.

2-жадвал

ЮЭМО ва ПБМО энергия сатҳлари орасидаги энергия фарқи

$\beta < 0$	ε (ЮЭМО)	ε (ПБМО)	Δ тирқиш
$n=2$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \alpha + \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \alpha - \beta$	$-4\beta \sin\left(\frac{\pi}{5}\right) = -2\beta$
$n=3$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = \alpha$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{3\pi}{4}\right) = \alpha - \sqrt{2}\beta$	$\Delta_u(n) = -2\beta \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\sqrt{2}\beta$

Ушбу жадвалдан кўриниб турибдики, ЮЭМО ва ПБМО энергия сатҳлари орасидаги тирқиш макромолекула занжиридаги уланишлар сонининг кўпайиши билан торайиб боради.

Нанозаррачанинг сирти билан ўзаро таъсирида макромолекула ЧАГ ининг атомларини қайта тақсимланиш жараёнларини моделлаштириш ва бунга нанополимерлардаги баъзи таркибий ўзгаришларнинг таъсири кўрсатилган. Агар цис-изомер сиртнинг қабарик қисмида ҳосил бўлса, у ҳолда виброн нотурғунлик шarti $K < 2C^2/\Delta$ бажарилганда, унинг кўчишини келтириб чиқаради ва самарали заряднинг тоқ симметрияга эга бўлган қисми унинг жойлашувини нотурғун қилади, бу эса цис-изомернинг кўшни ҳолатга, яни ботик юзали қисмга ўтишига олиб келади. Бундай жараёнлар транс-изомерлар учун нанокатализатор сиртининг ботик жойларига урилганда кузатилади. Шундай қилиб, катализатор юзасида транс- ва цис-изомерларни ажратиш ва танлаб олиш жараёни юзага келади.

Ўн учта компонентли кимёвий фаол тизимнинг кинетик потенциалини ўрганиш рақамли моделлаштириш усули билан ўтказилди. Бунда таҳлил этилган кимёвий тенгламалар 3-жадвалда келтирилган.

3-жадвал.

Тадқиқ қилинаётган тизим таркибий қисмларининг ўзаро алмашилиш каналлари

№	Реакция тенгламаси	Тезлик доимийси ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$)
1	$e + O_2 = O + O + e$	$3,0 \cdot 10^{-12}$
2	$e + N_2 = N + N + e$	$5,0 \cdot 10^{-12}$
3	$e + H_2O = H + OH + e$	$3,0 \cdot 10^{-12}$
4	$O_2^- + O_2^+ = O_2^S + O_2$	10^{-8}
5	$N + O_2 = NO + O$	$8,6 \cdot 10^{-17}$
6	$O_3 + O_2^S = O_2 + O_3$	$1,9 \cdot 10^{-15}$
7	$O_2 + H + M = HO_2 + M$	$1,1 \cdot 10^{-32}$
8	$N + NO_2 = N_2 + O_2$	$1,2 \cdot 10^{-11}$
9	$N + O_3 = NO + O_2$	$2,0 \cdot 10^{-16}$
10	$O + O_2 + M = O_3 + M$	$5,5 \cdot 10^{-34}$
11	$O + OH = O_2 + H$	$3,6 \cdot 10^{-11}$
12	$NO + O_3 = NO_2 + O_2$	$1,3 \cdot 10^{-14}$
13	$O + HO_2 = OH + O_2$	$9,0 \cdot 10^{-12}$
14	$OH + OH = H_2O + O$	$2,4 \cdot 10^{-13}$
15	$H_2 + OH = H_2O + H$	$9,0 \cdot 10^{-15}$
16	$H_2O + H = H_2 + OH$	$1,9 \cdot 10^{-12}$

Ҳисоблаш натижалари 4-жадвалда келтирилган, бу ерда (+) - квази-стационар ҳолат; (-) - стационар ҳолат йўқ.

4-жадвал.

$p = 50$ тор; $\eta_{H_2O} = 0,013$ даги стационар концентрациялар

Таркибий қисмлар	$\eta_{O_2} = 0.217$		$\eta_{O_2} = 0.740$		$\eta_{O_2} = 0.860$	
	см^{-3}	с	см^{-3}	с	см^{-3}	с
ОН	$0,51 \cdot 10^{14}$	1	$0,51 \cdot 10^{14}$	1	$0,51 \cdot 10^{14}$	1
НО ₂	$0,21 \cdot 10^{13}$	1	$0,21 \cdot 10^{15}$	1	$0,21 \cdot 10^{15}$	1
О	$0,34 \cdot 10^{14}$	1	$0,19 \cdot 10^{14}$	1	+	+
Н	$0,10 \cdot 10^{14}$	1	$0,17 \cdot 10^{13}$	1	+	+
Н	$0,38 \cdot 10^{16}$	1	$0,19 \cdot 10^{11}$	1	-	-
H ₂	$0,11 \cdot 10^{12}$	10	$0,19 \cdot 10^{11}$	100	+	+
NO ₂	+	+	$0,86 \cdot 10^{13}$	1	-	-
O ₃	-	-	$0,98 \cdot 10^{16}$	100	-	-
NO	-	-	$0,15 \cdot 10^{15}$	100	-	-
O ₂ ^S	-	-	$0,53 \cdot 10^{11}$	100	-	-

Икки ўлчовли ҳолатда, бошқарув параметрлари фазосидаги бифуркация чегаралари аналитик шаклда топилади:

Босимнинг пастки чегараси:

$$p^* = p_0 \cdot \varphi_0^{2/3} \quad (10)$$

$$p_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{K_{11}^2 (K_2/K_1) v_3}{K_{10} \cdot K_{14} \cdot O^3}}, \quad \varphi_0 \equiv \frac{(1 - \eta_{H_2O} - \eta_{O_2}) \sqrt{\eta_{H_2O}}}{\eta_{O_2}^2}, \quad (11)$$

бу ерда η_i – бошланғич газ аралашмасынинг нисбий таркиби, K_i – i -реакция тезлигининг доимийси, v_3 – H_2O нинг диссоциация частотаси, O - бу ҳароратга боғлиқ бўлган коэффициент. Юқори чегара:

$$p^{**} = p_1 \cdot \varphi_1^{2/3}; \quad (12)$$

$$p_1 \equiv \sqrt{\frac{K_{11}^2 v_3}{K_{10}^2 K_{14} \cdot O_3}}; \quad \varphi_1 \equiv \frac{2(1-\eta_{H_2O} \cdot \eta_{O_2}) \sqrt{\eta_{H_2O}}}{\eta_{O_2} \left[\left(\frac{K_1}{K_2} + 1 \right) \eta_{O_2} + \eta_{H_2O} - 1 \right]}. \quad (13)$$

p^{**} фақат $\eta_{O_2} > \dot{\eta}_{O_2}$ учун аниқланади, бу ерда $\dot{\eta}_{O_2}$ - бу босим барқарорлиги зонасининг юқори чегарасининг асимптотаси, қуйидаги ифода билан аниқланади:

$$\dot{\eta}_{O_2} = (1 - \eta_{H_2O}) / (1 + K_1/K_2). \quad (14)$$

4-жадвалда кимёвий фаол таркибий қисмларнинг кинетикасини ҳисоблаш натижалари кўрсатилган. Ушбу маълумотлардан келиб чиқадики, $p < p^*$ ($\eta_{O_2} = 0,217$) бўлганда, $[O_3]$, $[NO]$ ва $[O_2^S]$ концентрациялар аста-секин ўзгаради, қолган таркибий қисмлар эса стационар ҳолатга нисбатан тезроқ етиб боради. Стационар ҳолатда фазавий фазода эгарнинг мавжудлиги аниқланди. Физик жиҳатдан, бу $[O_3]$ концентрациянинг пасайишига олиб келади, бу чегарада у нолга тушади ва шу билан 9 ва 12-каналлар ёпилади. Маълумотлар шуни кўрсатадики, бошқарув параметрлари бифуркация нуктаси яқинида секинлашади. $p > p^{**}$ ($\eta_{O_2} = 0,86$) шарт бажарилганда турғун тугун N ва HO_2 учун нотурғунга айланади.

Электрон ион тизимнинг мувозанат шароитида макромолекуланинг ўлчамлари бўйича тақсимооти Пуассон функцияси билан ифодаланади, яъни унинг дисперсияси билан ўртача қиймати бир хил эканлиги кўрсатилган. Фазали ўтишнинг критик нуктасида аномал дисперсия кузатилади. Шунинг учун, мувозанат шароитида, зич тузилишдан ғовак тузилиш шаклидаги фазавий ўтиш эҳтимоли юзага келади. Макромолекуланинг фрактал ўлчови фазавий ўтишнинг баъзи хусусиятларини аниқлайди ва бу қуйидаги формулалар бўйича ҳисобланади

$$\gamma = \ln(n) / \ln(R/r). \quad (15)$$

Нанополимер тизимининг зичлиги ва макромолекула ҳажми ўртасидаги боғлиқлик ўрганилди (4-расм):

$$\ln(\rho) = \ln(const) - d \cdot \ln(R) \quad (16)$$

Ушбу расмдан кўришиб турибдики, $[R_{\min} - R_{\max}]$ ўлчов оралиғи мавжуд, унинг ичида макромолекула фрактал тузилишга эга.

Макромолекуланинг асосий хоссалари, унинг фрактал тузилишига қараб, қуйидаги тартибда намоён бўлади:

а) макромолекула зичлиги унинг R - чизиқли ўлчамини катталашини билан камаяди;

б) макромолекуланинг фрактал ўлчовининг катталашини билан зичликнинг ўлчамга боғлиқлиги пасаяди;

с) макромолекула тузилишининг фракталлик хоссалари икки томондан ўлчам билан чекланган, пастки- R_{\min} ва юқори- R_{\max} чегаралари экспериментал

маълумотлар билан таққослаш (ярим эмпирик ёндашув) йўли билан аниқланади.

Электрон ион жараёнларини синергетик моделлаштириш куйидаги икки босқичдан иборат:

а) макромолекула ЧАГ нотурғунлигини аниқлаш;

б) тартиб параметрлари сифатида нисбатан секин ўзгарадиган қисм олинади.

Виброн тасаввурлар реакция координатасини топишга ва бошқарув параметрлари билан ЮЭМО ва ПБМО энергия сатҳлари ўртасидаги боғланишни аниқлашга имкон беради.

Диссертациянинг “**Бир неча турдаги кимёвий реакцияларда электрон-ион жараёнларининг ўз-ўзини ташкиллаштириши**” номли тўртинчи бобда синергетик моделлаштириш усули билан кимёвий реакцияларнинг бир катор турлари ўрганилган.

1. Катенан халқасимон молекулаларини ажралиш реакциясини синергетикавий моделлаштириш. Катенан икки қўшалок халқа сифатида тасвирланади. Топоизомераза ферменти билан катенан халқаларини бириктириш жойлари - χ_1, χ_2 айлана шаклида кўрсатилган (5-расм). Бу расмда R – улар орасидаги масофа; σ – биринчи мувозанат ҳолатида топоизомераза доменлари орқали катенаннинг бир халқасини бириктириш жойи белгиланган. X_1, X_2 ва Y_3 стрелкали ўқлар ёрдамида доменлараро боғларнинг силжиши кўрсатилган. Q_{1g}, Q_{2g} – доменларнинг жуфт симметрияга эга бўлган силжишлари акс эттирилган. Узук-узук стрелка топоизомеразанинг ичидан биринчи халқани янги мувозанат ҳолатига силжиш йўналишини кўрсатади. Субстрат-фермент комплексининг адиабатик потенциали (АП) жуфт координата бўйлаб силжишда куйидагича ифодаланади: $\varepsilon_3 = \varepsilon_g - CQ + \frac{1}{2}kQ^2$. Бу ерда, ε_g – электрон асосий ҳолатининг энергияси; k – куч доимийси $Q = \sqrt{Q_{1g}^2 + Q_{2g}^2}$ – реакцияга мойил конформация (РМК) доменларининг силжиш координаталари, C - виброн доимийси.

Электрон субстратдан ферментга ўтгандан сўнг энергия қиймати куйидаги ифода ёрдамида ҳисобланади. $\varepsilon_2 = \varepsilon_q + \gamma Q + CQ + \frac{1}{2}kQ^2$; $\gamma = -\frac{2A}{R^3}$; $A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} Z_1 \cdot Z_2$. Бу формуладаги эффектив зарядлар Z_1 ва Z_2 реакция давомида ўз қийматини ўзгартиради.

Ян-Теллер эффекти туфайли катенан ва ферментнинг ўзаро яқинлашиш босқичида 1-“атом” Q_{1g} координатаси бўйлаб силжийди, бу доменнинг тартиб олинисига ҳисса қўшади. 1-“атом” ферментнинг Z^{++} марказига яқинлашганда, заряд кўчиши содир бўлади. Бу жараён ε_3 ва ε_2 - термларнинг кесишиш нуқтаси яқинидаги нурланишсиз ўтишдан иборат бўлиб, унинг координатаси: $Q_{23} = \frac{\varepsilon_g - \varepsilon_q}{2C - \gamma}$ ифода ёрдамида топилади. Маълумки, бундай ҳолатда ўтиш эҳтимоли куйидаги формула билан ҳисобланиши мумкин:

$$\omega = \frac{4\pi V^2 (2m)^{2/3}}{(h/2\pi)^{4/3} (F_3 \cdot F_2)^{1/3} (F_2 - F_3)^{2/3}} \Phi^2 \left(-kT \left(\frac{2m}{(h/2\pi)^2} \right)^{1/3} (1/F_3 - 1/F_2)^{2/3} \right), \quad (17)$$

бу ерда, $\Phi(x)$ – Эйри функцияси, V – ўтиш матрицасининг элементи, T – ҳарорат, m – конформернинг массаси. Термларнинг кесишиш нуктасидаги қиялик бурчаги қуйидаги формулалар бўйича виброн параметрларга боғлиқ бўлади:

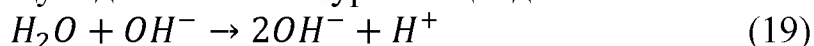
$$F_3 = \frac{k(\varepsilon_g - \varepsilon_q) - C(2C + \gamma)}{2C + \gamma}; \quad F_2 = \frac{k(\varepsilon_g - \varepsilon_q) + (\gamma + C)(2C + \gamma)}{2C + \gamma}; \quad F_2 - F_3 = \gamma + 2C \quad (18)$$

Заряднинг кўчиши туфайли, $Z_1 Z_1 + 1$ га айланади ва Z_2^{++} эса $Z_2^{++} - 1$ га айланади, Кулон итариш кучлари юзага келади. Ушбу жараён топоизомеразанинг фаол марказининг зарядланиши билан боғланган ҳалқани унга мувофиқ тарзда очилишидан иборат бўлади.

2. Дезацетилланиш реакциясининг элементар босқичини ўрганишнинг микроскопик модели. Хитин ЧАГининг учта компоненти кўриб чиқилади. 6-расмда ацетил гуруҳи ва N -ацетилглюкозаминнинг пираноз ҳалқаси ўртасидаги кимёвий боғланишнинг нотурғунлигига олиб келадиган протон яқинлашувида дезацетилланиш реакциясининг координатаси кўрсатилган. Ушбу расмда кўрсатилгандек реакция координаталарига мос келадиган симметрия икки турда (жуфт ва тоқ) бўлади.

Ушбу тебранишлар ацетил гуруҳи ва пираноз ҳалқаси ўртасидаги кимёвий боғни узилишига олиб келади. Ушбу жараён кимёвий тизимнинг маълум бир таркибий қисмини автокаталитик тарздаги реакция кинетикасида ўзини намоён қилиши кўрсатилди.

Реакция кинетикаси. Хитиннинг ишқорий гидролизининг автокаталитик босқичининг қуйидаги схемаси кўриб чиқилди:



Хитин макромолекулалари протонни ютиш орқали бу реакцияни фаоллаштиришда учинчи тананинг вазифасини ўтайди. Синергетика принципига кўра, ушбу реакциянинг кинетикасини ва автокаталитик реакциянинг асосий схемасини ўрганишда тезкор компонент - H^+ ни истисно қилишимиз мумкин $X + Y = 2Y$. Бундай схемадаги автокаталитик реакция синергетикада кўп қўлланилади. Хитиннинг мономер ҳалқаси иккиламчи амин бўлиб, у N -ацетилглюкозаминдан иборатдир. Унинг таркибидаги азот атоми пираноз ҳалқасининг C_2 углероди ҳамда ацетил гуруҳи билан боғланган (6-расм) бўлади. Бундай тузилмада ацетил гуруҳини протон билан сиқиб чиқарилиш жараёнини моделлаштириш қуйидаги АП ёрдамида амалга оширилади:

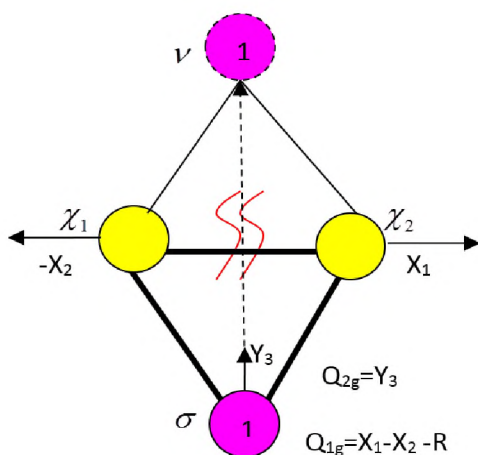
$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_u + \varepsilon_g}{2} + \frac{1}{2} k Q_u^2 - \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta + w_g)^2 + 4|a Q_u + w_u|^2} \quad (20)$$

a – виброн доимийси; k – куч доимийси; Z га боғлиқ қуйи симметрияга эга кўзғолишларнинг w_g – жуфт ва w_u – тоқ таркибий қисмлари.

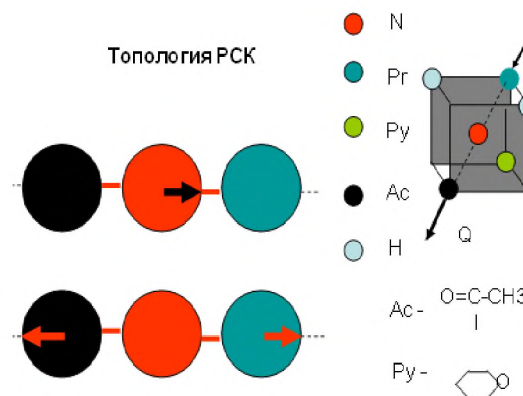
Агар $\frac{4|a Q_u + w_u|^2}{(\Delta - w_g)^2} < 1$ шарт бажарилса (20) ифодадан қуйидаги тақрибий ҳисоблаш формуласини топамиз:

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_g - \frac{w_g}{2} + \frac{1}{2} \left[k - \frac{2a^2 + \frac{w_u^2}{Q_u^2}}{\varepsilon_g - \varepsilon_u + w_g} \right] Q_u^2 \quad (21)$$

Ушбу (21) ифодадан кўриниб турибдики, реакцияга мойил конфигурация электрон тизимининг куйи симметрия кўзголишлари виброн лабилзация жараёнини кучайтиради ва шу билан дезацетилланиш жараёнини тезлаштириши мумкин.

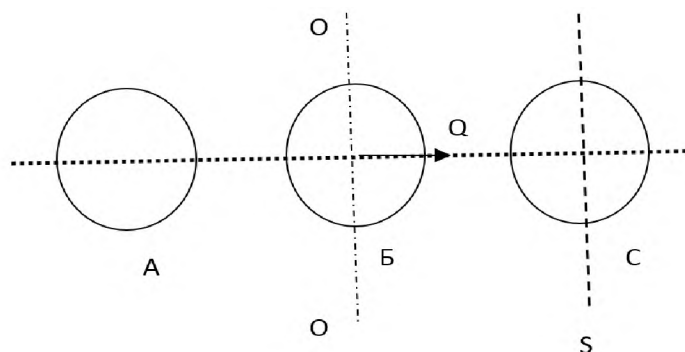


5-расм. “Катенан + топоизомераза - II” тизимининг уч атомлик чегараланган атомлар гурухи



6-расм. Маромолекула ЧАГ конфигурацияси ва дезацетилланиш реакциясининг геометрияси

3. Нанокластер юзасида димер диссоциацияси жараёнини моделлаштириш. Димернинг ярим чексиз катализатор юзаси билан ўзаро таъсири кўриб чиқилди. Реакцияга мойил конфигурация (РМК) макромолекуладаги 3 атомли ЧАГ: “А-Б-С” модели кўринишида тадқиқ этилди (7-расм).



7-расм. S нанокатализатор сиртида АБ димерининг нотурғун конфигурацияси; OO - ойна симметриясининг текислиги; Qu – уч атомлик комплекс АБС (реакция координатаси) нинг нотурғун координатаси.

Бунда “АБ” димер бўлиб, унинг диссоциацияси $AB + C = A + B + C$ схемаси бўйича ўрганилади. Ушбу схемада “С” катализаторнинг сиртини ифодалайди (каттик жисм ёки кластер). Жараённинг потенциал рельефини характерловчи АП (20) - ифодага мувофиқ ўрганилади. Бу ҳолда, энергия тирқиши

димернинг электрон энергиясининг Δ фарқи сифатида аниқланади ва w_s - катализатор сиртининг Тамм сатҳларидаги ўзгариш, $a = \langle g | \partial V / \partial Q_u | u \rangle$ эса виброн доимийсидир; k – куч доимийси; w_g ва w_u катталликлар Z – эффектив зарядга боғлиқ кўзголишнинг жуфт ва тоқ кўринишдаги таркибий қисмлари. Диссоциация координатаси бўйлаб потенциал энергия учун: $\frac{4|aQ_u + w_u|^2}{(\Delta + w_g)^2} \ll 1$,

шарт бажарилганда АП қуйидаги ифодадан топилади:

$$\varepsilon = \varepsilon_g - \frac{w_g}{2} + \frac{1}{2} \left[k - (2a^2 + \frac{w_u^2}{Q_u^2}) / (\varepsilon_g - \varepsilon_u + w_s) \right] Q_u^2. \quad (22)$$

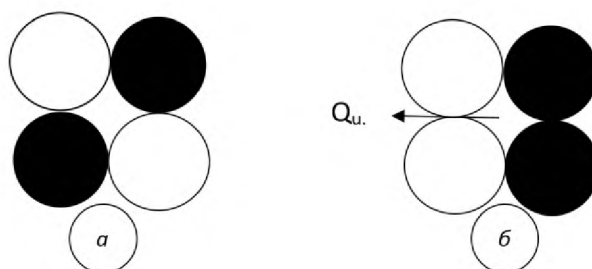
Ушбу ифодадан кўришиб турибдики, қуйи симметрияга эга кўзголишлари бўлмаганида, тебранишли стабилизация a -виброн доимийсининг ортиши ва димернинг Δ -ионизация потенциали ва катализатор юзасининг Тамм энергия сатҳлари ўртасидаги фарқнинг пасайиши билан ортади. Тоқ кўзголиш димерни нанокатализатор сирти билан таъсирлашувидан вужудга келган потенциал рельефни виброн лабилизацияланувига катта таъсир кўрсатади.

Диссертациянинг **“Сирт ножинсликларини нанозаррачаларнинг шаклланиш жараёнига таъсири”** номли бешинчи бобида макромолекуланинг атом тизимидаги тартибини бузилиши билан боғлиқ дисперсланиш жараёнлари тадқиқ этилган. Дисперслик даражаси сифатида A фаза таркибига B таркибий қисмини “қўшилиш” сонини назарда тутамиз. Полимер узунлиги – L бўйича ушбу нуқталарнинг “эритма” учун термодинамик потенциалини ёзамиз: $\varphi = \varphi_0 + kTn \ln(\frac{na}{2L}) + \psi_n$, биз уларнинг мувозанат концентрациясини $n = (\frac{L}{a}) \exp(-\frac{\psi}{kT})$ формуладан топамиз, бу ерда n “нуқталар” концентрацияси, a - звено узунлиги, ψ - битта контактнинг энергиясига тенг катталик. Шубҳасиз, $\psi < 0$ ва $n \rightarrow \frac{L}{a}$, шартлар бажарилганда тўла дисперсланиш кузатилади. Аксинча $\psi > 0$ бўлганда эса маълум сондаги ажратиш чегаралари мавжуд бўлади. Фаза чегаралари ўртасидаги таъсирлашувни қуйидаги катталик ёрдамида баҳолаш мумкин: $V = V_{AB} - \frac{1}{2}(V_{AA} + V_{BB})$ Ушбу катталик $V = 0.35$ га тенг бўлиб, хитин - хитозан сополимери учун “фазалар” AB нинг “қўшилиш” нуқталарининг қисман эриши мумкинлиги кўрсатилган.

Л. Ландаунинг теоремасига кўра бир ўлчовли тизимларда “фазалар” нинг биргаликда мавжудлиги имконсиздир, аммо квазибирўлчовли тизимларда мувозанат ва номувозанат шароитларда икки фазанинг боғланиш нуқталарини қисман эритиш эҳтимоли мавжуд.

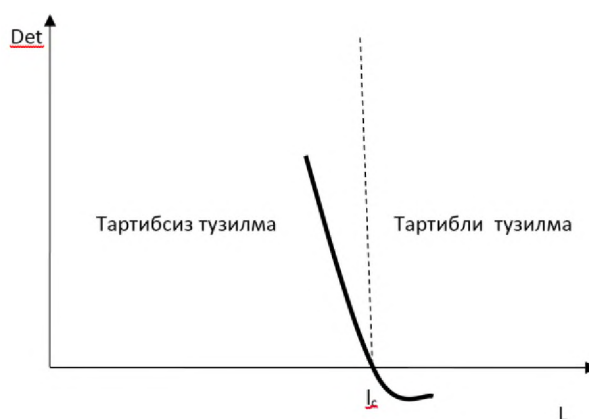
Нанокаталитик фаолиятнинг баъзи хусусиятларини бир ўлчовли моделлар доирасида олиш мумкинлиги кўрсатилган. Шундай қилиб, сиртдаги атомларнинг қайта жойлашувини потенциал рельефи цис- ва транс-изомерлар учун антибатик хусусиятга эга. Сирт таъсирини ҳисобга олмаганда, қуйидаги икки турдаги Ян-Теллер силжишлари кузатилиши мумкин: ромбик ва тетрагонал. Сирт электрон таъсирлар туфайли транс-изомернинг барқарорлашиши (8-а расм) ва цис-изомернинг эса

беқарорланиши кузатилади (8-б расм). Цис-изомер беқарор беқарор бўлиб, у Q_{ii} координатаси бўйлаб силжийди (8-б расм).



8-расм. Изомер молекулалар: а) Транс - ва б) Цис-тузилиш; Цис - изомернинг инерция марказининг силжиши.

Дезацетиланиш жараёни стационар ҳолатининг барқарорлигини куйидаги параметрларга боғлиқлиги ўрганилди: $E_{ЮЭМО} - E_{ПБМО}$ энергия тирқиши, K – гомополимер (хитин) ни гетерополимерга (хитозан) айланиш тезлиги доимийси, L – квазибир ўлчамли занжирнинг узунлиги.

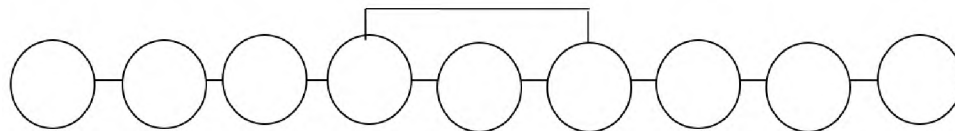


9-расм. Тенглама аниқловчиси (гессиян) нинг макромолекула узунлигига боғлиқлиги

Амин гуруҳларининг занжир бўйлаб тақсимланишининг $\tilde{\alpha}$ виброн доимийсига боғлиқлиги ўрганилди. Виброн доимийнинг ортиши билан фундаментал параметр - l_c нинг критик қийматини камайиши куйидаги қонуниятга бўсуниши $l_c \approx \frac{1}{\tilde{\alpha}}$ аниқланди (9-расмга қаранг).

Андерсон модели виброн нотурғунликлари ва нанотизимлардаги электронлар ҳолатининг ўзгаришларини улардаги турли нотартибликлар даражаси билан боғлашга асос бўлди. Куйидаги $PM \approx 1/(E_{ЮЭМО} - E_{ПБМО})$ реакцияга мойилликнинг виброн талқини доирасида макромолекуляр структура ва нанотузилмалар ўртасидаги таъсирлашувлар ўрганилди. Бундай талқин асосида олинган назарий маълумотлар хитинни дезацетиланиш жараёнида олинган маълумотлар билан сифат жиҳатидан мос келади. Кимёвий нуқтаи назардан, бу бирданига хитин димерида иккита фаол марказ мавжудлигига мос келади. Бу хитин мономерлари орасидаги гликозид боғ ва хитин мономерининг пираноз ҳалқасининг иккинчи углеродидаги ацетиламин гуруҳи ўртасидаги амид боғидир.

Турли ўлчамдаги боғламларни ўз ичига олган квазибирўлчамли полимер занжирлар кўриб чиқилади. Қуйида (10-расм), 4, 5, 6 атомларини ўз ичига олган учтомлик боғламани моделлаштирувчи 4 ва 6-чи атомлар ўртасида кимёвий ўзаро таъсирга эга бўлган занжир тузилишининг намунаси кўрсатилган.



10-расм. Квазибирўлчовли занжирдаги учатомлик ҳалқа

9 та қисмдан иборат бўлган макромолекуляр занжир учун, 4,5,6 уч атомлик ЧАГнинг электрон тузилишини аниқлаш учун қуйидаги тенгламалар олинган бўлиб, боғламасиз занжир учун:

$$X_0^3 - 2X_0 = 0, \quad (23)$$

боғламали занжир учун (бунда ε - кичик кўзғолиш) эса:

$$X^3 - 2X + 2\varepsilon = 0. \quad (24)$$

Экспериментал тадқиқотлар тоқ сондаги атомлардан иборат тузилмалар муҳим ва улар қатта эҳтимоллик билан кузатилишини кўрсатмоқда. Шунинг учун ҳар қандай тоқ сонли атомлардан иборат тузилма учун қўллаш мумкин бўлган ифодани қуйидагича ёзамиз: $X^n + \sum_{i=1}^{n-1} (-1)^i (n-i) X^{n-2i} = 0$. Шунини таъкидлаш муҳимки, кўзғолишнинг қиймати занжирлар сони N га тўғри пропорционал бўлиши билан бирга, боғланиш ҳосил бўлгандаги эластик деформация энергияси эса қуйидаги қонуният бўйича камаяди: $E = k/2[(2\pi/N)^2(N-2)]$. Нанозаррачаларнинг ҳосил бўлиш жараёнига номувозанат ҳолатларнинг таъсири ўрганилди. Эгри сиртли нанотузилмаларда текис сиртга нисбатан сиртнинг мусбат эгрилиги бўлган нанообъектлар учун Тамм сатҳи тақиқланган тирқишнинг ўртасига ва манфий эгриликли нанообъектларда эса, аксинча, Тамм сатҳи рухсат этилган энергия чегараларига томон силжиши кўрсатилган. Бир қатор ходисаларни бундай "силжишлар" га жуда сезгир эканлиги аниқланган.

Бунда R - эгрилик радиусига эга бўлган сиртдаги электроннинг энергияси қуйидагича аниқланади:

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \phi(R). \quad (25)$$

$$\phi(R) \equiv \left\{ 2 \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2}} - \frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2} - \left[1 - \frac{1}{6} \sqrt{\frac{E_g^0 + A/R^2}{\hbar^2/2ma^2}} \right] \right\}. \quad (26)$$

$\phi(R)$ нинг қиймати, нанотузилманинг эгрилик радиуси ортиши билан камаяди, яни $d\phi(R)/dR < 0$ бўлади.

Демак, Тамм $\psi(x) = Ae^{\alpha x}$; ($x < 0$) - тўлқин функциясининг α - кўрсатгичи қуйидаги формула ёрдамида ифодаланади:

$$\alpha = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2} - \phi(R)}. \quad (27)$$

Ушбу формуладан R - катталиқнинг кичик қийматларига α нинг ҳам кичик қийматлари тўғри келади, яни қуйидаги тенгсизлик ўринли бўлиши керак:

$$\frac{d\alpha}{dR} > 0. \quad (28)$$

Ушбу таҳлил натижасида қуйидаги иккита муҳим натижага эришилди:

1) нанозаррачанинг радиуси кичиклашганда, Тамм сатҳи рухсат этилган зонага пастдан яқинлашиб, ортади;

2) нано-заррачанинг радиуси кичиклашуви билан Тамм тўлқин функциясининг локализация даражаси ҳам пасаяди.

Бундай жараёнларни миқдорий таҳлил қилиш учун резонанс интегралининг аналитик формуласини топиш мумкин. Резонанс интегралининг R - чизикли ўлчамга боғлиқлиги қуйидагича ифодаланadi:

$$\beta_{pp} = \beta_{pp}^0 \exp\left(-\alpha \frac{b}{2R} a\right). \quad (29)$$

Дарҳақиқат, кўплаб изланишларга кўра, i ва j атомлари орасидаги боғланиш тартиби кимёвий боғ узунлиги ортгани сари камаяди. Ушбу маълумотларга асосланиб, P_{ij} боғ тартибини d – боғланиш узунлигига боғлиқлиги топилди:

$$P_{ij} = 7.75 - 5d. \quad (30)$$

Бунда P_{ij} нисбий бирликларда, d эса ангстремларда ўлчанади. Нанозаррача сиртидаги боғланиш узунлиги $\Delta d = ab/2R$ миқдорга ортса, P_{ij} ҳам ΔP_{ij} га камаяди. Буни қуйидаги формула ёрдамида топилади:

$$P_{ij} = P_{ij}^0 - \Delta P_{ij} = P_{ij}^0 - \frac{5b \cdot a}{2R} \quad (31)$$

P_{ij}^0 - текис сиртдаги боғланиш тартиби. Ушбу таҳлилга мувофиқ эгрилик радиусининг камайиши билан i ва j атомлар ўртасидаги эркин валентлик индекси $-F_{i,j}$ қуйидаги қонуният бўйича ортади:

$$F_{i,j}(R) = F_{i,j}^0 + \frac{5b \cdot a}{2R} \quad (32)$$

a, b, R параметрлар ангстремларда ўлчанади.

ХУЛОСА

“Виброн тушунчалар асосида полимер нанотизимлардаги ўз-ўзини ташкиллаштириш жараёнларини синергетик моделлаштириш” мавзусидаги докторлик диссертацияси бўйича олиб борилган тадқиқотлар бўйича қуйидаги хулосалар тақдим этилади:

1. Полимер нанотизимларда атомлар жойлашувидаги ўзгариш жараёнларини синергетикавий моделлаштириш асосида замонавий кимёвий реакцияларининг концепцияси ва синергетика усуллари ётади. Кимёвий реакцияларининг концепцияси электрон-ион тизимларини микроскопик моделини ўрганиш ва макромолекула чегараланган атомлар гуруҳининг лабил координатасини топиш имкониятини беради.

2. Автокаталитик реакция босқичини таҳлил қилиш учун виброн нотурғунлик концепциясидан фойдаланилади. Ишлаб чиқилган усулга

мувофик полимер нанотизимларда атомлар жойлашувида юз берувчи ўзгариш жараёнлари, тизимнинг атомлар қисмини ўлчами ва ўлчови, ҳамда сирт электронлари энергия сатҳлари билан ўзаро боғланиши аниқланди.

3. Макромолекула ўлчамини ортиши билан ЮЭМО ва ПБМО ўртасидаги энергия тирқишини кичрайиши кўрсатилган. Атомлар занжирида боғламалар мавжудлиги ёки йўқлигига қараб макромолекула чегараланган атомлар гуруҳида юз берувчи виброн нотурғунлик ходисалари сифат жиҳатдан бир-биридан тубдан фарқ қилиши кўрсатилган. Макромолекуляр тузилма фрактал ўлчовининг ортиши билан нанополимер тузилма зичлигининг ортиши аниқланган.

4. Бир хил зичликдаги икки нанополимер турли ўлчамга эга бўлса, уларнинг кичик ўлчамдагисининг фрактал ўлчови катта бўлиши кўрсатилган. Бундай боғланиш полимер нанотизимларда сирт атомларининг эркин валентлиги ҳақидаги тушунчалар асосида топилган. Нанополимер тизим сирт эгрилиги ва сирт атомларнинг эркин валентлиги ўртасидаги аналитик боғланиш назарий ишлаб чиқилган. Унга биноан нанополимер тизим ўлчамининг камайиши билан сирт атомларининг эркин валентлиги ортади. Автокатализнинг янги механизми очилган.

5. Реагентлар ўртасида электрон кўчиши туфайли нанополимер сиртидаги электронлар U – манфий хоссаларни намоён қилиши туфайли унинг электрон-ион структурасида спонтан ўзгаришлар юзага келиши аниқланган.

6. Ночизиқлик кинетикани ўрганишда синергетика усулларида фойдаланиб, тартиб параметри сифатида номувозанат ҳолатидаги кимёвий тизимнинг нисбатан секин ўзгарувчи таркибий қисмлари PLASER компьютер дастури ёрдамида ҳисоблаб топилган. Бошқарув параметрлари фазосида бифуркацилар тўплами топологик моделлаштириш асосида ўрганилган ва уларнинг аналитик моделлари тузилган. Нанополимер тизимнинг кинетик ва адиабатик потенциалларини таҳлил қилиш асосида виброн константалар, ЮЭМО ва ПБМО ўртасидаги энергия тирқишини ва реакция тезлиги константаси билан ифодаланган бошқарув параметрларини топиш мумкинлиги кўрсатилган.

7. Нанозимика ва нанокимё соҳаларига оид баъзи масалаларни ечиш асосида синергетикавий моделлаштириш усулини нанотизимлардаги атомларнинг қайта жойлашув жараёнларини тадқиқ этишдаги имкониятлари намоён этилган.

8. Макромолекула чегараланган атомлар гуруҳи тўрт атомли модели ёрдамида катенанни ажралиш механизми таклиф этилган ва энергия термлари аро нурланишсиз ўтиш эҳтимоллигини баҳолаш асосида фермент шаклини ўз-ўзини ўзгартириш жараёнида унинг фаол марказини заряд ҳолатидаги ўзгаришнинг аҳамияти аниқланган.

9. Сирт электронларини ҳисобга олган ҳолда нанозаррача сиртида димер диссоциясисини асосий модели тузилган ва ЮЭМО ва ПБМО

ўртасидаги энергия тирқиши билан сирт электронлар энергия сатҳи ўртасидаги нисбатига боғлиқ бўлган механизм топилган.

10. Квазибирўлчовли нанофрактал объектларда номувозанат шароитда Кюри-Пригожин принципини бузилиши ва фазаларни биргаликда мавжуд бўлишига оид Ландау теоремаси, ҳамда электронларни Андерсон мужассамлашуви каби фундаментал қонуниятлар ўрганилган.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/30.12.2019.K/FM/T.36.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ХИМИИ И ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ**
ИНСТИТУТ ХИМИИ И ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ
АНДИЖАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
АНДИЖАНСКИЙ МАШИНОСТРОИТЕЛЬНЫЙ ИНСТИТУТ

АСКАРОВ БАХОДИРЖОН

**СИНЕРГЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
САМООРГАНИЗАЦИИ В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОСИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ
ВИБРОННЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ**

01.04.06 – физика полимеров
02.00.12 – нанохимия, нанофизика и нанотехнология
(физико-математических наук)

АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ
ДОКТОРА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК (DSc)

Ташкент – 2021

Тема диссертации доктора наук (DSc) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером В2021.1.DSc/FM173

Диссертация выполнена в Институте химии и физики полимеров АН РУз, Андijanском государственном университете и Андijanском машиностроительном институте.

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).

Научные консультанты:

Рашидова Сайёра Шарифовна
доктор химических наук, академик

Оксенгендлер Борис Леонидович
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Мамадалимов Абдугафур Тешабаевич
доктор физико-математических наук, академик

Матрасулов Даврон Урунович
доктор физико-математических наук, профессор

Нечипоренко Юрий Дмитриевич
доктор физико-математических наук, профессор

Ведущая организация:

Ташкентский государственный технический университет

Защита диссертации состоится «05» ноября 2021 г. в 14⁰⁰ 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, дом 7^б. Тел.: (99871) 241-85-94, факс: (99871) 241-26-61, e-mail: polimer@academy.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института химии и физики полимеров за № 25. (Адрес: 100128, г. Ташкент, ул. Абдулла Кадыри, дом 7^б. Тел.: (99871) 241-85-94).

Автореферат диссертации разослан «22» октября 2021 года.
(реестр протокола рассылки № 2 от 22.10 2021 года).



Н.Р. Ашуров
Председатель разового научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.т.н., профессор

М.М. Усмавова
Учёный секретарь разового научного
совета по присуждению ученых
степеней, к. х. н., с.н.с.

С.С. Негматов
Председатель семинара разового научного
совета по присуждению ученых степеней,
д.т.н., академик

ВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации(DSc) доктора наук)

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время особое внимание уделяется нанообъектам ввиду их уникальных свойств, возникающих из-за особенностей их сложной структуры. Одной из важных задач в исследованиях общих закономерностей поведения сложных систем является синергетическое моделирование процессов самоорганизации в полимерных наносистемах. Разработка новых методов описания сложных объектов в условиях далеких от равновесия является актуальной задачей физики полимеров.

Как показывают проводимые во всем мире исследования наноразмерных объектов, в том числе и таких сложных как живые системы занимают методы термодинамики, нелинейной динамики, электронной структуры и описание процессов, происходящих в данных объектах. В настоящее время в мире ведущими исследователями сделан ряд важных открытий, связанных с темой диссертации и определяющих ее актуальность и востребованность. Например, исследование каталитических процессов в полимерных наносистемах, которое позволяет непосредственно в процессе полимеризации синтезировать полимерные нанокомпозиты. Данные процессы описываются современными физическими концепциями, такими как синергетика, фрактальный анализ, модели необратимой агрегации, концепция аномальной диффузии. Одной из приоритетных задач является проведение целенаправленных исследований в таких направлениях, как изучение закономерностей физико-химических процессов в пространственных областях нанометровых размеров. При этом необходимо решить задачу управления и описания атомной и электронной подсистемы нанообъектов, исследования механизмов химических реакций, применение вибронной теории для полимерных наносистем, химической кинетики нанокатализа, процессов саморганизации и роста нанообъектов, в том числе в живых системах.

В нашей Республике уделяется большое внимание закономерностям физико-химических процессов в пространственных областях нанометровых размеров с целью управления отдельными атомами, молекулами, молекулярными системами при создании новых молекул, наноструктур, наноустройств и материалов со специальными физическими, химическими и биологическими свойствами. В интеграционном процессе науки с образованием, а также при решении задач по объединению теоретических и практических знаний имеют важное значение синергетика.

Данная научно-исследовательская работа определенной мере служит задачам, предусмотренным в Указах Президента Республики Узбекистан за № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 7 февраля 2017 года, Постановлению Президента Республики Узбекистан № ПП-5032 от 19 марта 2021 г. «О мерах по повышению качества

образования и совершенствованию научных исследований в области физики».

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

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации. Фундаментальными исследованиями атомной и электронной структуры, механизмов химических реакций нанообъектов, в том числе полимерных наносистем, химической кинетики нанокатализа, процессов саморганизации и роста нанообъектов занимаются ведущие научно-исследовательские центры и высшие учебные заведения, такие, как Штутгартский университет, Университет Мартин-Лютера, Университет Фридрих-Александра, Университет Эрлангена-Нюрнберга (Германия), Международный университет Флориды (FIU), Калифорнийский университет, Университет Лос-Анжелеса штата Аризона (США), Брюссельский свободный университет (Бельгия), Ульяновский государственный аграрный университет имени П.А. Столыпина, Математический институт им. В. А. Стеклова, Институт прикладной математики (Россия) и др.

На мировом уровне ведутся исследования по применению методов синергетики в различных областях науки и техники, исследованы процессы самоорганизации в естественных и социальных системах (Центр синергетики при Институте теоретической физики университета, Штутгарт, Германия), изучаются процессы самосборки в биополимерных структурах (Французский государственный университет, Франция), предложены теоретические подходы к общим принципам описания самосборки и самоорганизации неравновесных квантовых наносистем конденсированного состояния (Институт химии и химико-фармацевтических технологий, Россия), показано существование неравновесных термодинамических систем, которые, при определённых условиях, поглощая вещество и энергию из окружающего пространства, могут совершать качественный скачок к усложнению (диссипативные структуры) (Брюссельский университет, Бельгия), развиты новые методы конструктивного анализа решений широкого класса нелинейных параболических уравнений с источниками и стоками, проведен анализ диффузионного хаоса и сложной упорядоченности в системах реакция-диффузия (Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Россия), разработан математический аппарат теории катастроф для описания синергетических процессов (Университетская группа Сорбонны, Франция), изучен динамический хаос и проблемы сложности, развита теория фракталов и фрактальная геометрия (Калифорнийский технологический институт, США), на основе геометрии самоподобных объектов описаны структуры динамического хаоса, которая позволяет эффективно сжимать информацию при распознавании и хранении образов

(Парижский университет, Франция), с помощью нелинейных методов описан синтез, сборка, транспорт, стабильность, реакционная активность, а также функционирование материалов на основе наночастиц (Национальный научный фонд, США).

В настоящее время в мире по нелинейной динамике, самоорганизации, синергетике проводятся исследования в ряде приоритетных областей, в том числе, динамики любых необратимых процессов и возникновения принципиальных новаций, математического аппарата синергетики, который скомбинирован из разных отраслей теоретической физики: нелинейной неравновесной термодинамики, теории катастроф, теории групп, тензорного анализа, дифференциальной топологии, неравновесной статистической физики, социальных, экономических, педагогических наук, экологии, электронике, нанотехнологии и др.

Степень изученности проблемы. Изучением неравновесных процессов в области открытых систем, необратимости процессов, флуктуациям ее состояний и диссипации энергии, термодинамики необратимых процессов, иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах проводятся многими учеными, в том числе и бельгийскими (И. Пригожин и др., немецкими (Г. Хакен), американскими (М.Фейгенбаум), российскими (. П. Курдюмов). Однако данные исследования не были применены для описания полимерных систем и образующихся на основе их наносистем.

Синергетика дала новую трактовку нелинейных процессов, как в неживых, так и в живых системах благодаря работам учёных мира, как французскими (Х. Бенард), британскими (Р. Мей, Х. Холдейн, В. Волтерра, А. Тюринг, А. Лотка, Ж. Ньюменн), американскими (Э. Лорентц), голландскими (Ф. Такенс), бельгийскими (Д. Рюэлл), немецкими (ФФ. Шлёгл). Значительный вклад ученых был внесен в теорию дифференциальных уравнений, теорию динамических систем, теорию хаоса, механику жидкостей. Тем не менее, до сих пор не ясна теория роста наночастиц, нанокатализа, влияния фрактальности и размерности на проявляемые ими свойства.

Благодаря синергетическому подходу выявлен новый класс процессов самоорганизации - явление детерминированного хаоса в области статистической физики и теории динамических систем, изучалось многими учеными, как американскими (М. Фейгенбаум, Г. Биркхоф), французскими (Й. Помо, П. Манневилл), российскими (Л.П. Каданов, П. Берже, Г. Г. Малинецкий, А. Б. Потапов, А. В. Подлазов). Нерешенными являются задачи о применении вибронной концепции в определении координаты химической реакции, неустойчивости и размерные эффекты при химических реакциях с участием полимеров.

Описаны процессы возникновения самоорганизации в нелинейных системах, изучены нелинейные явления в сложных квантовых объектах, фрактальные свойства синергетических объектов, синергетические свойства нанополимерных систем, вибронные аспекты реакционной способности

поверхности наночастиц. Метод синергетики применен для изучения динамических свойств прорастания семян хлопчатника, капсулированных полимерными агропрепаратами и наносистемами на их основе. Продолжаются исследования по разработке возможных схем управления химическими реакциями на основе определения бифуркационного множества системы «реагент+продукт», необходимо отметить узбекистанских ученых (С.Ш. Рашидова, Б.Л. Оксенгендлер, Н.Н. Тураева), внесших вклад в эти исследования. В тоже время нерешенными являются процессы, происходящие на поверхности нанокластеров, исследование автокаталитической стадии процесса полимеризации. Однако поверхностные электронные состояния наночастиц, использование принципа Кюри – Пригожина (эффект неравновесности) в модели роста наночастиц в неравновесных условиях не изучены.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского и высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Исследования по теме диссертационной работы выполнены в Институте химии и физики полимеров АНРУз в рамках Государственной научно-технической программы фундаментальных исследований по следующим темам: ФА-Ф7-Т-008: «Взаимосвязь биологически активных свойств нанополимерных систем от условий синтеза и модификации природных полисахаридов»; ФА-Ф-3-Т 100: «Наноструктуры в полимерах, пути создания и закономерности их проявления в специальных свойствах полисахаридов».

Цель исследования разработка метода синергетического моделирования процессов самоорганизации электрон-ионной системы нанополимерных систем и изучение свойств полимерных наносистем на его основе.

Задачи исследования:

разработка основной модели для изучения вибронной неустойчивости локальной группы атомов (ЛГА) макромолекулы;

изучение связи между нелинейной кинетикой и вибронной неустойчивостью локальной группы атомов (ЛГА) макромолекулы;

исследование процессов самоорганизации электронно-ионной структуры в полимерных наносистемах;

определение управляющих параметров и синергетическое моделирование элементарных стадий топологической реакции расщепления колец катенана, реакции дезацетилирования и процесса диссоциации димера на поверхности наночастицы;

изучение влияния поверхностных электронных состояний на свойства полимерных наносистем;

изучение электронных эффектов (U - отрицательность) влияния на автокаталитическую стадию процесса самоорганизации;

расширение области применения методов и моделей синергетики на основе исследования эффектов размера и размерности полимерных наноструктур.

Объектом исследования является электронно-ионная система макромолекулы. Основными параметрами объекта являются характерный размер и размерность (в том числе и фрактальная) и их электронно-колебательные характеристики.

Предметом исследования являются следующие процессы: электронно-ионные процессы в нанополимерных системах; процессы формирования наномасштабных структур при неравновесных условиях в электронно-ионной системе макромолекулы; вибронные эффекты ЛГА макромолекулы; эффекты неравновесности в процессах роста наночастицы и процессы диспергирования в макромолекулярных системах.

Методы исследований. Используются методы синергетики для исследования процессов самоорганизации электрон-ионных процессов в наномасштабных макромолекулярных системах. Электронная структура ЛГА анализируется методами квантовой химии. Численное интегрирование уравнений нелинейной кинетики многокомпонентной химической системы проведено с помощью пакета программ «PLASER» методом Гира. Бифуркации динамической системы изучены методом Тома-Арнольда. В настоящей диссертации метод топологического моделирования адаптирован к проблемам более широкого класса объектов макромолекулярной природы.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

впервые введено понятие локальной группы атомов (ЛГА) макромолекулы для изучения процессов самоорганизации полимерных наносистем;

впервые построены топологические модели исследования неустойчивостей стационарных состояний химической кинетики и бифуркаций в ЛГА;

впервые установлена связь автокатализа с U –отрицательными свойствами электронно-ионной системы в полимерных наносистемах.

определен критерий нарушения принципа Кюри-Пригожина в нанообъектах.

определено влияние поверхностных электронных состояний на электрон-ионные процессы полимерных наносистем;

впервые для моделирования процесса самоорганизации в макромолекулах использованы понятия свободной валентности, вибронной неустойчивости и низкосимметричных возмущений локальной группы атомов макромолекулы;

впервые разработан алгоритм для моделирования процессов самоорганизации полимерных наносистем путем анализа связи между нелинейной кинетикой и вибронной неустойчивостью локальной группы атомов (ЛГА) макромолекулы;

определены элементарные стадии топологической реакции расщепления колец катенана, реакции дезацетилирования N-ацетилглюкозамина и процесса диссоциации димера на поверхности наночастицы.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

разработана методика определения в выдыхаемом воздухе человека метаболитов обмена биогенных аминов, которая использована для диагностики ишемической болезни сердца;

определено значение изменения обмена липидов и углеводов в процессе развития атеросклероза;

определено условие возникновения автокаталитической стадии при окислительно – восстановительных реакциях;

применено в практику учебно-методическое пособие интерактивного обучения медицинских кадров основанного на методах синергетики.

Степень достоверности проведенных исследований показывают достигнутое качественное согласие полученных на основе вибронных моделей и кинетических схем результатов с экспериментальными данными. Во-вторых, вибронные модели локальной группы атомов макромолекулы не противоречат вибронной концепции химических реакций И.Б. Берсукера, а развивает её на основе понятия параметра порядка синергетики и при отсутствии несимметричной части управляющего параметра наблюдается полное соответствие с ним.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научную значимость результатов работы составляет вибронная концепция химических реакций, интегрированная с методами синергетики. На такой основе разработан алгоритм для изучения атомных перестроек в наносистемах. Данный алгоритм путем использования критерия вибронной неустойчивости используется для изучения атомных перестроек локальной группы атомов макромолекулы. Управляющие параметры синергетического моделирования позволяют провести классификацию динамических характеристик нанополимерной системы, что имеет научно-практическое значение при планировании экспериментов. В особенности метод синергетического моделирования и вибронная концепция химических реакций имеет большое практическое значение, благодаря возможности исследования процессов атомных перестроек в нанобъектах.

Практическую значимость результатов работы составляет синергетическое моделирование раскрывающее неизвестные ранее патогенетические механизмы развития болезней сердечно-сосудистой системы. Эффекты локализации и делокализации атеросклеротических структур вдоль артериальных сосудов, а также новые синергетические особенности взаимовлияния диабета и атеросклероза открывают новые пути, поиска методов лечения болезней человека, что указывают на высокую значимость полученных результатов в медицинской практике.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов синергетическое моделирование процессов самоорганизации полимерных наносистемах на основе вибронных представлений:

связь автокатализа с U – отрицательными свойствами, критерий нарушения принципа Кюри-Пригожина в нанообъектах и эффекты влияния поверхностных электронных состояний на электрон-ионные процессы полимерных наносистем, методика синергетического моделирования и полученные на его основе выше приведенные результаты применены Ошским государственным университетом при выполнении научно-исследовательского проекта № ДН-22-2019 “Новые технологии управления процессами взаимопревращения наноструктурных дефектов в неметаллических кристаллах”. (Справка № 210 от 04.12.2020 выданной Ошским государственным университетом Кыргызской Республики). В результате появилась возможность управления физико-химических свойств нановолокон с фрактальной структурой;

алгоритм изучения связи между нелинейной кинетикой и вибронной неустойчивостью локальной группы атомов макромолекулы, а также результаты по моделированию активности топоизомеразы применены при выполнении фундаментального проекта ССВ-Ф-037 «Изучение роли протеаз и протеаза-активированных рецепторов печене в патогенетических механизмах нарушения функции пищеварительных желез» (Справка № 89-03-4727 от 16.11.2020 выданная МВССО РУз). В результате появилась возможность качественной оценки изменений в функциях протеаз и рецепторов печене;

построенные нами полезные модели изучения процесса самоорганизации в макромолекулах с использованием понятий свободной валентности, вибронной неустойчивости и низкосимметричных возмущений локальной группы атомов макромолекулы применены при выполнении фундаментального проекта № Ф2-ФА-Ф162 “Взаимодействие многоатомных частиц с поверхностью твердого тела”. (Справка № 2/1255-2740 от 04.12.2020 выданная АН РУз). В результате получено возможность изучения процессов ионизации многоатомных частиц на фрактальной поверхности.

Апробация результатов исследования. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 9 международных и 7 республиканских конференциях.

Опубликованные результаты исследования. По теме диссертации опубликованы 33 научных работ, из них 17 научных статей, в том числе 3 в зарубежных и 14 в республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций. Кроме того, имеется 3 документа на интеллектуальную собственность (одно авторское свидетельство, два рацпредложения и один алгоритм моделирования нелинейной кинетики и определения параметра бифуркации).

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, из пяти глав, разделенных на две части, заключения, списка литературы из 180 наименований и одного приложения. Содержит 195 страницы основного текста, 72 рисунков и 12 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении на основании анализа фундаментальной основы синергетики и обзора её приложений в различных областях науки, и в том числе, в области биополимерной науки и живых систем, обоснована актуальность и востребованность темы диссертации и сформулирована постановка проблемы. Кратко сформулированы цель и задачи диссертационной работы, изложены научная новизна и практические результаты исследования, обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта их теоретическая и практическая значимость, приведены сведения о внедрении результатов исследования и данные о структуре диссертации.

В первой главе диссертации, названная **«Обзор методов и моделей синергетики»** приведены результаты сравнительного изучения методов синергетики. На основе анализа методов синергетики для изучения процессов самоорганизации в макромолекуле выбраны два метода: методы теории катастроф и дискретных отображений. Показана достаточность этих двух методов для качественного исследования основных особенностей нелинейных систем, рассматриваемых в диссертационной работе. Методы теории катастроф использованы для исследования как непрерывных, так скачкообразных процессов самоорганизации в физико-химических системах. Методы дискретного отображения использованы для изучения состояния человека в норме и патологии на основе анализа временного ряда медицинских показателей сердца и легких.

Во второй главе диссертации, названная **«Электрон-ионные процессы в квазиодномерных наносистемах»** особое внимание уделяется конформенту электронов и фрактальности границы раздела наночастицы. Отдельно выделены эффекты искажений и упорядочения в наносистемах и указано на возможность их качественных изменений под действием вибронного взаимодействия.

Сформулирован процесс самоорганизации наномасштабного кластера, как задача определения биологической активности хитозана в зависимости от эффекта упорядочения относительного расположения мономерных звеньев.

Приведено микроскопическое описание необратимых процессов на основе вибронных представлений. Путем анализа базовых моделей синергетики показано ограниченность понятий и представлений равновесной химической кинетики при решении синергетических задач.

Проведен сравнительный анализ методов микроскопического описания химических реакций. Метод корреляционных диаграмм МО требует теоретико – группового анализа МО, для классификации их по симметрии.

Методом Фукуи для анализа мономолекулярных реакций разделяют молекулу на две части. Разделенные части должны содержать одна ВЗМО, а другая НСМО. При этом возникает трудность из-за неоднозначности деления молекулы. Более, совершенный метод определения пути максимального перекрытия с сохранением узловой структуры молекулярных орбиталей был разработан Триндлом.

Дьюар разработал метод изучения бимолекулярных реакций путем анализа МО комплексов при малых смещениях ядер одного реагента. При этом внутримолекулярное перемешивание электронных состояний создает силу за счет поляризации, а межмолекулярное взаимодействие приводит к образованию химической связи. Формально энергию можно записать:

$$\varepsilon = \varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0 + \langle \psi_{R_1 R_2}^0 | H | \psi_{R_1 R_2}^0 \rangle + \sum_k \frac{\langle \psi_{R_1 R_2}^0 | H | \psi_{R_1 R_2}^k \rangle}{\varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0 - \varepsilon_{\{R_1 R_2\}}^k} \quad (1)$$

где $\varepsilon_{R_1}^0 + \varepsilon_{R_2}^0$ - энергия свободных реагентов R_1 и R_2 ; $\psi_{R_1 R_2}^0 \approx \psi_{R_1}^0 \psi_{R_2}^0$ - волновая функция основного состояния комплекса из R_1 и R_2 . Такое рассмотрение позволяет определить форму $\varepsilon(Q)$ вблизи Q_R и определить энергетически выгодное направление в начальной стадии реакции, но в переходном состоянии этот метод наталкивается на трудности. Для преодоления этой трудности электронно-колебательное взаимодействие учитывается при определении U - полной потенциальной энергии системы. При таком подходе поверхность потенциальной энергии в пространстве колебательных мод $\varepsilon(Q)$ во втором порядке теории возмущений имеет вид:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \langle \psi_0 | \frac{\partial U}{\partial Q} | \psi_0 \rangle Q + \langle \psi_0 | \frac{\partial^2 U}{\partial Q^2} | \psi_0 \rangle \frac{Q^2}{2} + \sum_k \frac{|\langle \psi_0 | \frac{\partial U}{\partial Q} | \psi_k \rangle Q|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_k} \quad (2)$$

Очень важную роль в исследованиях химической кинетики играет также теория переходного состояния Эйринга. Эта теория обходит динамическую часть задачи, и перегруппировка ядер в ходе реакции описывается классической механикой. Реагенты находятся в динамическом равновесии с активированным комплексом: $T \leftrightarrow R_1 + R_2$ с константой равновесия:

$$K_0 = \exp(\Delta S/k) \exp(-U/kT) \quad (3)$$

где ΔS разность энтропии реагента и активированного комплекса. Распад активированного комплекса - T на продукты - P , рассматривается как необратимый процесс: $T \rightarrow R$. Константа реакции: $K_T = kT/h$; следовательно скорость превращения R на P в теории переходного состояния равна: $K = K_0 \cdot K_T$. Однако, ни энергия активации, ни энтропия активации, не могут быть рассчитаны с необходимой точностью, что сильно ограничивает применимость данного подхода.

Согласно нашему подходу к исследованию химических реакций, рассматривается устойчивость локальной группы атомов ЛГА макромолекулы на основе вибранных представлений. Для определения управляющих параметров неустойчивости локальной группы атомов вдоль

цепи макромолекулы потенциальный рельеф вдоль координаты реакции Q представлен в следующем виде:

$$W = \frac{U_0}{2} (1 + \cos(\frac{2\pi}{a} Q)) \quad (4)$$

Потенциал взаимодействия между химическим компонентом и локальной группой атомов (ЛГА) макромолекулы написан в общем виде:

$$V = U_n (\frac{a}{Q})^n; n = 1, U_1 = -\frac{Ze^2}{a} \quad (5)$$

Полный потенциальный рельеф: $E = V + W$. Таким образом, путем разложения функции $E(Q)$ в ряд по малому смещению вблизи точки Q_0 т.е. в точке нахождения ЛГА и обозначив величину смещения $X = Q - Q_0$ получим:

$$E = U_0 - \frac{U_0\pi^2}{a^2} X^2 + \frac{U_0\pi^4}{3a^4} X^4 + U_n \frac{a^n}{U_0^n} (1 - \frac{nX}{Q_0}) \quad (6)$$

Экстремумы потенциала $E(X)$ определим из условия $\frac{dE}{dX} = 0$ что приводит к следующему соотношению для определения экстремумов потенциала:

$$X^3 - \frac{3a^2}{2\pi^2} X - \frac{3na^{4+n}}{4U_0\pi^4 Q_0^{n+1}} = 0; u_1 = -\frac{3a^2}{2\pi^2}; u_2 = -\frac{3na^{4+n}}{4U_0\pi^4 Q_0^{n+1}}. \quad (7)$$

Согласно этим соотношениям, при заданном значении расстояния между двумя смежными минимумами потенциального рельефа только высота энергетического барьера определяет возможность реализации элементарного акта реакции между химическими компонентами. Уменьшение энергетического барьера реакции приводит к увеличению абсолютного значения управляющего параметра - u_2 .

В третьей главе диссертации “Синергетическое моделирование электрон-ионных процессов в квазиодномерных нанобъектах” изложен метод синергетического моделирования электрон-ионных процессов в квазиодномерных нанобъектах. Процессы самоорганизации в атомной подсистеме макромолекулы возникают, только вдали от равновесного состояния (Рис. 1).

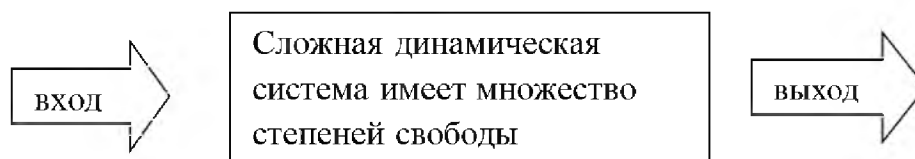


Рис. 1. Схема поддержки неравновесного состояния

Нанополимерные системы рассматриваются как квазиодномерная линейная цепочка с n звеньями (Рис. 2). Квазиодномерность означает, что каждое звено обладает внутренней структурой, от устойчивости которой зависит поведение цепочки в целом.

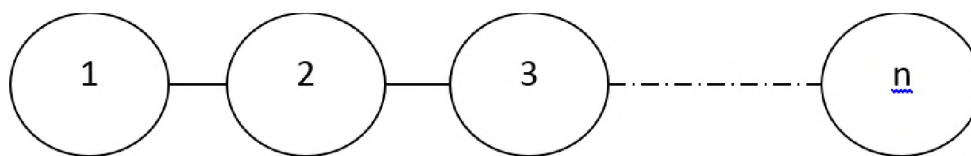


Рис. 2. Схема квазиодномерной цепочки макромолекулярной структуры

В этом случае уровни энергии - ε_k для n - электронов можно вычислить по следующей формуле (табл. 1):

$$\varepsilon_k = \alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi k}{n+1}\right). \quad (8)$$

Таблица 1

Энергетические уровни линейной цепочки

ε_k	k=1	k=2	k=3
n=2	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \alpha + \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \alpha - \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\pi = \alpha - 2\beta$
n=3	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \alpha + \sqrt{2}\beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = \alpha$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{3\pi}{4}\right) = \alpha - \sqrt{2}\beta$

Диаграмма уровней энергии - ε_k и энергетическая щель - Δ между ВЗМО и НСМО показана на рис. 3. $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1; \Delta = -\sqrt{2}\beta; \beta < 0$.

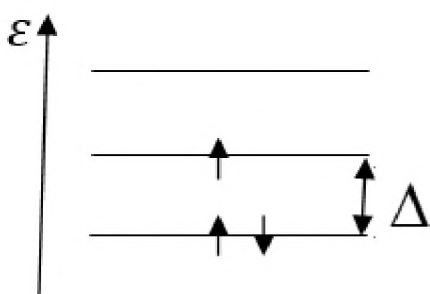


Рис.3. Энергетическая щель между ВЗМО и НСМО

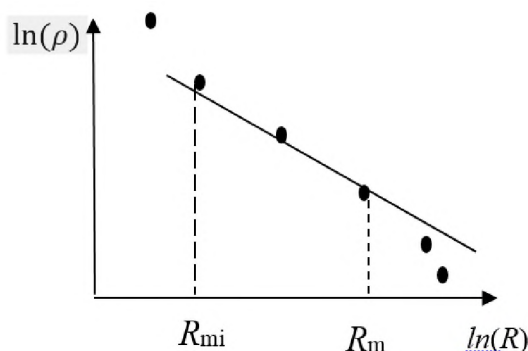


Рис.4. Зависимость плотности нанополимерной системы от размера макромолекулы

Энергетическая щель между уровнями энергии ВЗМО и НСМО для четного и нечетного числа электронов определяется по формулам:

$$\Delta_g(n) = -4\beta \sin\left(\frac{\pi}{2n+1}\right); \quad \Delta_u(n) = -2\beta \sin\left(\frac{\pi}{n+1}\right); \quad (9)$$

Таблица 2

Энергетическая щель между уровнями энергии ВЗМО и НСМО

$\beta < 0$	$\varepsilon(\text{ВЗМО})$	$\varepsilon(\text{НСМО})$	$\Delta(\text{цель})$
n=2	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \alpha + \beta$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \alpha - \beta$	$-4\beta \sin\left(\frac{\pi}{5}\right) = -2\beta$
n=3	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = \alpha$	$\alpha + 2\beta \cos\left(\frac{3\pi}{4}\right) = \alpha - \sqrt{2}\beta$	$\Delta_u(n) = -2\beta \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = -\sqrt{2}\beta$

Как видно из табл. 2 энергетическая щель между уровнями энергий ВЗМО и НСМО сужается с увеличением числа звеньев цепочки макромолекулы.

Моделируя процессы атомных перестроек ЛГА макромолекулы при взаимодействии с шероховатой поверхностью наночастицы показана возможность некоторых структурных изменений в нанополимерах. Если на выпуклой части поверхности образуется цис-изомер, то $K < 2C^2/\Delta$ и вибронная неустойчивость инициирует его миграцию, а нечётное возмущение эффективного заряда дестабилизирует его местоположение (A), что приводит к переходу цис-изомера в соседнее положение (I) с вогнутой поверхностью. Аналогичное поведение для трансизомера наблюдается при его попадании на вогнутые места поверхности нанокатализатора. Так возникает процесс разделения и селективного захвата транс- и цис-изомеров на поверхности катализатора.

Исследование кинетического потенциала для тринадцати компонентной химически активной системы, осуществлено методом численного моделирования, химические уравнения приведены в табл.3.

Таблица 3

Каналы взаимопревращений компонентов исследуемой системы

№	Уравнения реакций	Константа скорости ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$)
1	$e + O_2 = O + O + e$	$3,0 \cdot 10^{-12}$
2	$e + N_2 = N + N + e$	$5,0 \cdot 10^{-12}$
3	$e + H_2O = H + OH + e$	$3,0 \cdot 10^{-12}$
4	$O_2^- + O_2^+ = O_2^S + O_2$	10^{-8}
5	$N + O_2 = NO + O$	$8,6 \cdot 10^{-17}$
6	$O_3 + O_2^S = O_2 + O_3$	$1,9 \cdot 10^{-15}$
7	$O_2 + H + M = HO_2 + M$	$1,1 \cdot 10^{-32}$
8	$N + NO_2 = N_2 + O_2$	$1,2 \cdot 10^{-11}$
9	$N + O_3 = NO + O_2$	$2,0 \cdot 10^{-16}$
10	$O + O_2 + M = O_3 + M$	$5,5 \cdot 10^{-34}$
11	$O + OH = O_2 + H$	$3,6 \cdot 10^{-11}$
12	$NO + O_3 = NO_2 + O_2$	$1,3 \cdot 10^{-14}$
13	$O + HO_2 = OH + O_2$	$9,0 \cdot 10^{-12}$
14	$OH + OH = H_2O + O$	$2,4 \cdot 10^{-13}$
15	$H_2 + OH = H_2O + H$	$9,0 \cdot 10^{-15}$
16	$H_2O + H = H_2 + OH$	$1,9 \cdot 10^{-12}$

Результаты расчета приведены в табл.4, где (+) – квазистационарное состояние; (-) – отсутствует стационарное состояние.

В двумерном случае найдены границы бифуркации в пространстве управляющих параметров в аналитическом виде:

Нижняя граница давления:

$$p^* = p_0 \cdot \varphi_0^{2/3} \quad (10)$$

$$p_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{K_{11}^2(K_2/K_1)v_3}{K_{10} \cdot K_{14} \cdot O_3}}, \quad \varphi_0 \equiv \frac{(1-\eta_{H_2O}-\eta_{O_2})\sqrt{\eta_{H_2O}}}{\eta_{O_2}^2}, \quad (11)$$

Верхняя граница:

$$p^{**} = p_1 \cdot \varphi_1^{2/3}; \quad (12)$$

$$p_1 \equiv \sqrt{\frac{K_{11}^2 v_3}{K_{10} K_{14} \cdot O_3}}; \quad \varphi_1 \equiv \frac{2(1-\eta_{H_2O} \cdot \eta_{O_2})\sqrt{\eta_{H_2O}}}{\eta_{O_2} \left[\left(\frac{K_1}{K_2} + 1 \right) \eta_{O_2} + \eta_{H_2O} - 1 \right]}; \quad (13)$$

p^{**} определена только при $\eta_{O_2} > \dot{\eta}_{O_2}$ здесь $\dot{\eta}_{O_2}$ – асимптота верхней границы зоны стабильности по давлению, определяемая выражением:

$$\dot{\eta}_{O_2} = (1 - \eta_{H_2O}) / (1 + K_1/K_2). \quad (14)$$

Таблица 4

Стационарные концентрации при $p = 50$ тор; $\eta_{H_2O} = 0,013$

Компонент	$\eta_{O_2} = 0.217$		$\eta_{O_2} = 0.740$		$\eta_{O_2} = 0.860$	
	см ⁻³	с	см ⁻³	с	см ⁻³	с
ОН	0,51·10 ¹⁴	1	0,51·10 ¹⁴	1	0,51·10 ¹⁴	1
НО ₂	0,21·10 ¹³	1	0,21·10 ¹⁵	1	0,21·10 ¹⁵	1
О	0,34·10 ¹⁴	1	0,19·10 ¹⁴	1	+	+
Н	0,10·10 ¹⁴	1	0,17·10 ¹³	1	+	+
Н	0,38·10 ¹⁶	1	0,19·10 ¹¹	1	–	–
Н ₂	0,11·10 ¹²	10	0,19·10 ¹¹	100	+	+
NO ₂	+	+	0,86·10 ¹³	1	–	–
O ₃	–	–	0,98·10 ¹⁶	100	–	–
NO	–	–	0,15·10 ¹⁵	100	–	–
O ₂ ^s	–	–	0,53·10 ¹¹	100	–	–

В табл. 4, приведены результаты численного расчета кинетики химически активных компонентов. Из этих данных следует, что при $p < p^*$ ($\eta_{O_2} = 0,217$) концентрации $[O_3]$, $[NO]$ и $[O_2^s]$ медленно изменяются, тогда, как остальные компоненты сравнительно быстро выходят на стационарное состояние. Определено наличие неустойчивого седла в стационарном состоянии. Физически это приводит к уменьшению концентрации $[O_3]$, которая в пределе стремится к нулю, и тем самым закрываются каналы 9 и 12. Из данных видно, что параметр порядка в окрестности точки бифуркации замедляется. При $p > p^{**}$ ($\eta_{O_2} = 0,86$) устойчивый узел превращается в неустойчивый для Н и НО₂.

Показано, что в равновесных условиях распределения по размерам макромолекулы описывается функцией Пуассона, которая характеризуется равенством среднего значения размера с его дисперсией. В критической точке фазового перехода наблюдается аномальная дисперсия. Поэтому в равновесных условиях возникает возможность структурного фазового переходом плотной структуры в рыхлую. Фрактальная размерность макромолекулы определяет некоторые особенности фазовых переходов и вычисляется по формуле:

$$\gamma = \ln(n) / \ln(R/r). \quad (15)$$

Изучена зависимость между плотностью нанополимерной системы и размером макромолекулы (Рис.4):

$$\ln(\rho) = \ln(const) - d \cdot \ln(R) \quad (16)$$

Как видно из этого рисунка, существует интервал $[R_{\min}-R_{\max}]$ размеров внутри которого макромолекула обладает фрактальной структурой. Основные свойства макромолекулы зависящие от фрактальности её структуры сводятся к следующим положениям:

а) плотность макромолекулы уменьшается с ростом её размера – R ;

б) с увеличением фрактальной размерности макромолекулы линии в зависимости плотности от размера уменьшается;

в) фрактальность структуры макромолекулы ограничена с двух сторон по размеру. Нижний - R_{\min} и верхний - R_{\max} пределы определяются путем сопоставления (полуэмпирический подход) с экспериментальными данными.

Синергетическое моделирование электрон-ионных процессов осуществляется путем реализации следующих двух стадий,

а) определения неустойчивости ЛГА макромолекулы;

б) выбор медленно изменяющей компоненты в качестве параметра порядка.

Вибронные представления позволяют найти координату реакции и установить связь управляющего параметра с энергетической щелью между уровнями энергии ВЗМО и НСМО.

В четвертой главе диссертации, названная «**Электрон-ионные процессы самоорганизации в некоторых классах химических реакций**» методом синергетического моделирования изучены несколько классов химических реакций.

1. Синергетическое моделирование процесса распада катенана на циклоцепные молекулы. Рассмотрим структуру катенана в виде зацепленных двух циклоцепных молекул. На рис. 5, места захвата колец катенана с помощью фермента топоизомеразы показаны в виде кружочков: χ_1, χ_2 где R – расстояние между ними; σ – место захвата первого кольца катенана с доменами топоизомеразы в начальном равновесном состоянии. В виде стрелок показаны X_1, X_2 и Y_3 - смещения междоменных петель. Q_{1g}, Q_{2g} - симметричные четные смещения доменов. Штриховая стрелка показывает направление выталкивания первого кольца из полости топоизомеразы в новое равновесное состояние.

Адиабатический потенциал (АП) фермент субстратного комплекса вдоль четной координаты смещения: $\varepsilon_3 = \varepsilon_g - CQ + \frac{1}{2}kQ^2$. Здесь ε_g – энергия основного состояния электронной подсистемы; k - силовая константа вдоль $Q = \sqrt{Q_{1g}^2 + Q_{2g}^2}$ - координаты смещения доменов реакционноспособной конформации (РСК), C - вибронная константа. Энергетический терм после переноса электрона с субстрата на фермент имеет следующий вид: $\varepsilon_2 = \varepsilon_q +$

$\gamma Q + CQ + \frac{1}{2}kQ^2$; $\gamma = -\frac{2A}{R^3}$; $A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} Z_1 \cdot Z_2$. Заряды Z_1 и Z_2 по мере протекания реакции изменяют свою величину.

В стадии взаимного сближения катенана и фермента за счет эффекта Яна - Теллера происходит смещение «атома» 1 вдоль координаты Q_{1g} , что способствует втягиванию фрагментом – «атома» 1. По мере сближения «атома» 1 с Z^{++} имеет место перезарядка путем безизлучательного перехода с терма ϵ_3 на терм ϵ_2 вблизи точки пересечения с координатой: $Q_{23} = \frac{\epsilon_g - \epsilon_q}{2C - \gamma}$. Как известно, вероятность перехода можно вычислить по формуле:

$$\omega = \frac{4\pi V^2 (2m)^{2/3}}{(h/2\pi)^{4/3} (F_3 \cdot F_2)^{1/3} (F_2 - F_3)^{2/3}} \Phi^2 \left(-kT \left(\frac{2m}{(h/2\pi)^2} \right)^{1/3} (1/F_3 - 1/F_2)^{2/3} \right), \quad (17)$$

где $\Phi(x)$ - функция Эйри, V -матричный элемент перехода, T – температура, m – масса конформера. Углы наклона термов в точке их пересечения зависят от вибронных параметров по следующим формулам:

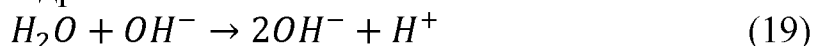
$$F_3 = \frac{k(\epsilon_g - \epsilon_q) - C(2C + \gamma)}{2C + \gamma}; \quad F_2 = \frac{k(\epsilon_g - \epsilon_q) + (\gamma + C)(2C + \gamma)}{2C + \gamma}; \quad F_2 - F_3 = \gamma + 2C \quad (18)$$

После перезарядки, означающей, что Z_1 превращается в $Z_1 + 1$, а Z_2^{++} переходит в $Z_2^{++} - 1$, возникает кулоновское отталкивание. Эта стадия соответствует согласованному размыканию связанного кольца путём перезарядки активного центра топоизомеразы.

2. Микроскопическая модель изучения элементарного акта реакции дезацетилирования. Рассмотрена трех компонентная локальная группа атомов хитина. На рис.6, показана составляющая координаты реакции дезацетилирования, вдоль которой, происходит приближение протона, приводящее к лабильзации химической связи между ацетильной группой и пиранозным кольцом N –ацетилглюкозамина. Координата реакции как показано на этом рисунке имеет две моды с соответствующей симметрией (четная и нечетная моды).

Данные колебательные моды приводят к разрыву химической связи между ацетильной группой и пиранозным кольцом. Показано, что данный эффект проявляется в кинетике реакции в виде автокаталитического размножения определенной компоненты сложной химической системы.

Кинетика реакции. Рассмотрена следующая схема автокаталитической стадии реакции щелочного гидролиза хитина:



Макромолекула хитина играет роль третьего тела в активации данной реакции, поглощая протоны. Согласно принципу синергетики можем исключить быструю компоненту - H^+ при исследовании кинетики данной реакции и базовую схему автокаталитической реакции в следующем виде: $X + Y = 2Y$. Данная автокаталитическая схема широко используется в синергетике.

Мономерное звено хитина представляет с собой вторичный амин – N ацетилглюкозамин, азот которого связан С-2 углеродом пиранозного кольца

и ацетильной группой (Рис.6.). Моделирование проводится с помощью следующего АП:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_u + \varepsilon_g}{2} + \frac{1}{2} k Q_u^2 - \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta + w_g)^2 + 4|aQ_u + w_u|^2} \quad (20)$$

a – вибронная константа; k – силовая константа; w_g – четная и w_u – нечетная компоненты низкосимметричного возмущения, зависящие от ΔZ .

При выполнении условия $\frac{4|aQ_u + w_u|^2}{(\Delta - w_g)^2} < 1$, из соотношения (20), находим следующее его приближенное выражение:

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_g - \frac{w_g}{2} + \frac{1}{2} \left[k - \frac{2a^2 + \frac{w_u^2}{Q_u^2}}{\varepsilon_g - \varepsilon_u + w_g} \right] Q_u^2 \quad (21)$$

Из выражения (21) следует, что низкосимметричные возмущения электронной подсистемы реакционно-способной конфигурации (РСК) усиливают процесс вибронной лабилизации и могут, таким образом, ускорить процесс дезацетилирования.

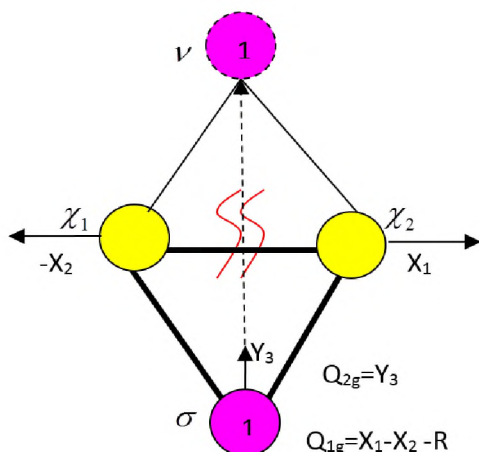


Рис.5. Трехатомная локальная группа атомов системы «катенан+топоизомераза – I»

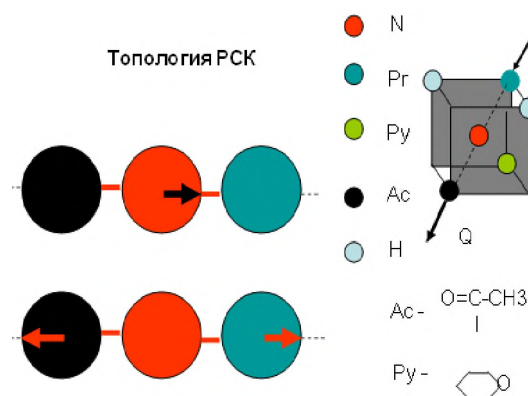


Рис.6. Реакционно - способная конфигурация и геометрия реакции дезацетилирования

3. Проведено моделирование процесса диссоциации димера на поверхности нанокластера. Рассмотрено взаимодействие димера с поверхностью полубесконечного катализатора.

Реакционно-способная конфигурация (РСК) представлена в виде модели 3-х атомной ЛГА макромолекулы: «А-Б-С», где «А-Б» - димер, диссоциация которого изучается по схеме $AB + C = A + B + C$, при этом «атом-С» поверхность катализатора (твердое тело, либо кластер) (Рис.7.).

Вибронная лабилизация потенциального рельефа изучается по (20). В данном случае энергетическую щель Δ определяем как разность в электронных энергиях димера и w_s - поверхностных уровней Тамма катализатора, остальные параметры $a = \langle g | \partial V / \partial Q_u | u \rangle$ - вибронная константа; k - силовая константа; w_g - четная и w_u - нечетная компоненты возмущения, зависят от ΔZ – эффективного заряда. Для потенциального рельефа вдоль

координаты диссоциации при выполнении условия: $\frac{4|aQ_u+w_u|^2}{(\Delta+w_g)^2} \ll 1$, находим следующее выражение:

$$4. \quad \varepsilon = \varepsilon_g - \frac{w_g}{2} + \frac{1}{2} \left[k - (2a^2 + \frac{w_u^2}{Q_u^2}) / (\varepsilon_g - \varepsilon_u + w_s) \right] Q_u^2. \quad (22)$$

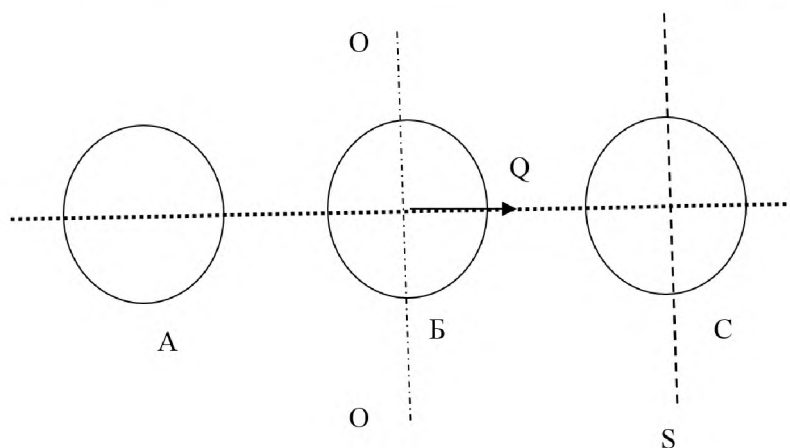


Рис. 7. Неустойчивая конфигурация димера АБ на поверхности нанокатализатора S; ОО - плоскость зеркальной симметрии; Q_u - неустойчивая мода трёхатомного комплекса АВС (координата реакции).

Как видно из этого выражения, в случае отсутствия низкосимметричных возмущений вибронная лабилизация усиливается с ростом a - вибронной константы и уменьшением Δ - разности потенциалов ионизации димера и таммовского уровня энергии поверхности катализатора. Нечетное возмущение вносит существенный вклад, усиливая эффект вибронной лабилизации потенциального рельефа взаимодействия димера с поверхностью нанокатализатора.

В пятой главе диссертации, названная «Влияние неоднородности поверхности на процессы формирования наночастиц» описаны процессы диспергирования связанные с неупорядоченностью в атомной подсистеме макромолекулы. Под степенью дисперсности будем понимать число «вкраплений» компоненты B в составе фазы A . Записывая термодинамический потенциал для «раствора» этих точек на длине полимера L : $\varphi = \varphi_0 + kTn \ln(na/2L) + \psi_n$ получим равновесную их концентрацию $n = (L/a) \exp(-\psi/kT)$, где n - концентрация «точек», a - размер звена, ψ - энергия одного контакта. Очевидно, что при $\psi < 0$ $n \rightarrow L/a$, т.е. полному диспергированию, при $\psi > 0$ имеется некоторое конкретное число границ раздела. Путем оценки величины $V = V_{AB} - \frac{1}{2}(V_{AA} + V_{BB}) = 0.35$ показано частичное растворение точек соприкосновения «фаз» А-В для сополимера хитин - хитозан.

Согласно известной теореме Л. Ландау в одномерных системах невозможно сосуществование «фаз», однако в квазиодномерных системах существует возможность частичного растворения точек соприкосновения двух фаз, как в равновесных, так и неравновесных условиях.

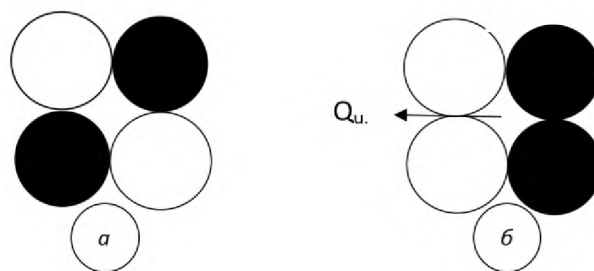


Рис.8. Изомерные молекулы: а) транс- и б) цис-структура; Q_u – смещение центра тяжести цис-изомера

Показано, что некоторые особенности нанокаталитической активности можно получить в рамках одномерных моделей. Так потенциальный рельеф атомных перестроек на поверхности имеет антибатный характер для цис- и транс-изомеров. Без учета влияния поверхности возможны два типа искажений Яна-Теллера: ромбическая и тетрагональная. Влияния поверхности приводит к стабилизации транс-изомера (Рис.8-а) и дестабилизации цис-изомера (Рис.8-б). Цис-изомер является неустойчивой и смещается вдоль координаты Q_u (Рис.8-б).

Исследована зависимость устойчивости стационарного состояния процесса дезацетилирования аминополисахарида от следующих параметров: $E_{ВЗМО} - E_{НСМО}$ – энергетическая щель, K – константа скорости реакции превращения гомополимера (хитин) в гетерополимер (хитозан), и L – длина



Рис.9. Зависимость детерминанта устойчивости (гессиян) уравнения от длины макромолекулы.

квазиодномерной цепи макромолекулы.

Изучено распределение аминных групп вдоль цепи полисахарида с длиной - L . Найдена зависимость фундаментальной постоянной l_c от \tilde{a} – вибронной константы. Показано, что с увеличением вибронной константы критическое значение длины фундаментального параметра - $l_c \approx \frac{1}{\tilde{a}}$ уменьшается (рис. 9). Это позволяет сделать вывод о возможности увеличения реакционной способности макромолекулы с уменьшением её L – длины.

Андерсоновская модель стала базовой моделью при исследовании состояния электронов в неупорядоченных системах. В квазиодномерных

системах она позволяет связать неупорядоченность атомной структуры с реакционной способностью квазиодномерного объекта. В рамках вибронных представлений величина $PC \approx 1/(E_{НСМО} - E_{ВЗМО})$. Это соотношение качественно согласуется с данными полученными в процессе дезацетилирования хитина. С химической точки зрения, этому соответствует наличие на димере хитина, сразу 2-х активных центров. Это гликозидная связь между мономерами хитина и амидной связи между ацетиламинной группой у второго углерода пиранозного кольца мономера хитина.

Рассмотрены квазиодномерные полимерные цепи, содержащие петли различного размера. Ниже показано (рис.10), характерный пример петлевой структуры, у которой имеется химическое взаимодействие между 4-ым и 6-ым атомом, что моделирует трехатомную петлю включающие атомы 4, 5, 6.

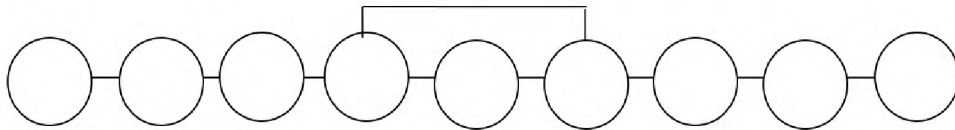


Рис. 10. Квазиодномерная цепь с трехатомной петлей

Для макромолекулярной цепи с 9 звеньями локальная группа атомов из трехатомного фрагмента 4,5,6 получены следующие уравнения для определения электронного спектра:

$$X_0^3 - 2X_0 = 0, \quad (23)$$

без петли, и

$$X^3 - 2X + 2\varepsilon = 0. \quad (24)$$

с петлей (здесь ε возмущения).

Экспериментальные исследования показывают, что петли с нечётным числом атомов важны и наблюдаются более вероятно. Поэтому запишем общее полезное выражения для любого нечетного случая: $X^n + \sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} (-1)^i (n-i) X^{n-2i} = 0$. Важно отметить, линейный характер зависимости возмущения от числа атомов $-N$, тогда как энергия упругого взаимодействия связанная с образованием атомной петли падает по закону $E = k/2[(2\pi/N)^2(N-2)]$.

Изучены эффекты неравновесности в процессах роста наночастиц. Показано, что для нанобъектов с энергетической щелью в спектре и с положительной кривизной поверхности характеризуются стягиванием уровней Тамма к середине запрещенной зоны по сравнению с плоской поверхностью, тогда нанобъекты с отрицательной кривизной наоборот приводят к сдвигу уровней Тамма к границам разрешенных электронных зон. Многие явления оказываются очень чувствительными к таким «сдвигам».

Так энергия электрона на поверхности с радиусом кривизны R определяется:

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \phi(R). \quad (25)$$

$$\phi(R) \equiv \left\{ 2 \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2}} - \frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2} - \left[1 - \frac{1}{6} \sqrt{\frac{E_g^0 + A/R^2}{\hbar^2/2ma^2}} \right] \right\}. \quad (26)$$

Значение $\phi(R)$ с увеличением радиуса кривизны уменьшается, т.е. $d\phi(R)/dR < 0$.

Таким образом, показатель α в волновой функции Таммовского электрона $\psi(x) = A \exp(\alpha x)$; ($x < 0$) имеет вид:

$$\alpha = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{h^2/2ma^2} - \phi(R)}. \quad (27)$$

С уменьшением R величина α также уменьшается:

$$\frac{d\alpha}{dR} > 0. \quad (28)$$

Получены два важных результата:

1) при уменьшении радиуса наночастицы - R уровень Тамма возрастает, приближаясь к U_0 снизу.

2) при уменьшении радиуса наночастицы - R уменьшается степень локализации волновой функции Тамма α .

Для количественного анализа подобных процессов в рамках приближения ближайших соседей удается найти аналитическую формулу для резонансного интеграла. Зависимость резонансного интеграла - β_{pp} от линейного размера R имеет следующий вид:

$$\beta_{pp} = \beta_{pp}^0 \exp\left(-\alpha \frac{b}{2R} a\right). \quad (29)$$

Действительно, согласно многочисленным исследованиям, порядок связи между атомами i и j уменьшается с увеличением длины связи. На основе этих данных получена зависимость порядка связи P_{ij} от её длины d :

$$P_{ij} = 7.75 - 5d. \quad (30)$$

Здесь P_{ij} измеряется в относительных единицах, а d - в ангстремах. Увеличение длины связи на поверхности наночастицы на $\Delta d = ab/2R$ приводит к уменьшению P_{ij} на ΔP_{ij} по закону:

$$P_{ij} = P_{ij}^0 - \Delta P_{ij} = P_{ij}^0 - \frac{5b \cdot a}{2R} \quad (31)$$

где P_{ij}^0 - порядок связи на плоской поверхности. Соответственно этому индекс свободной валентности $F_{i,j}$ атомов i и j растет с уменьшением радиуса по закону:

$$F_{i,j}(R) = F_{i,j}^0 + \frac{5b \cdot a}{2R} \quad (32)$$

здесь a, b, R измеряется в ангстремах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований в рамках докторской диссертационной работы по теме “Синергетическое моделирование процессов самоорганизации на основе вибронных представлений в полимерных наносистемах» сделаны следующие заключения:

1. В основе синергетического моделирования процессов атомных перестроек в полимерных наносистемах лежат концепция химических реакций и методы синергетики. Концепция химических реакций позволяет построить микроскопическую модель изучения электронно-ионной системы и

найти лабильную координату атомных перестроек локальной группы атомов макромолекулы.

2. В методе синергетического моделирования концепция вибронной неустойчивости используется для анализа автокаталитической стадии реакции. Согласно разработанного метода процессы атомных перестроек полимерной наносистемы исследованы в зависимости от размера и размерности атомной подсистемы и энергетических уровней поверхностных электронов.

3. Показана сужение энергетической щели между уровнями ВЗМО и НСМО с увеличением размера макромолекулы. Показано качественное различие эффекта вибронной неустойчивости ЛГА макромолекулы для её линейной и квазиодномерной модели путем анализа её электронной структуры с петлевой конформацией цепочки атомов. Определено увеличение плотности нанополимерной системы с увеличением фрактальной размерности её макромолекулярной структуры.

4. При одинаковой плотности двух нанополимерных систем возможны две их модификации различающиеся по своим размерам. Нанополимерная система с меньшими размерами обладает большей фрактальной размерностью и наоборот. Такая зависимость получена также на основе представлений о свободной валентности поверхностных атомов полимерной наносистемы. Получена аналитическая зависимость между кривизной поверхности нанополимерной системы и свободной валентностью атомов на поверхности. С уменьшением размера нанополимерной системы увеличивается свободная валентность поверхностных атомов. Введено новое представление в механизм автокатализа.

5. Поверхностные электроны в нанополимерных системах проявляют U отрицательные свойства с переносом электрона между реагентами (изменение эффективного заряда) происходит спонтанное изменение электрон-ионной структуры нанополимерной системы.

6. Методы синергетики использованы при изучении нелинейной кинетики. С помощью компьютерной программы PLASER определены медленно изменяющиеся компоненты неравновесной химической системы в качестве параметра порядка. Изучены бифуркационные множества в пространстве управляющих параметров методом топологического моделирования и построены аналитические модели. Найдены управляющие параметры от вибронных констант, энергетической щели между уровнями ВЗМО и НСМО и констант скоростей реакции на основе анализа адиабатического и кинетического потенциалов нанополимерной системы.

7. На основе решения ряда задач нанохимии и нанофизики продемонстрированы возможности метода синергетического моделирования в исследованиях атомных перестроек в наносистемах.

8. Предложен механизм расщепления катенана с помощью трех атомной локальной группы макромолекулы и установлена роль перезарядки

активного центра в процессе самоорганизации формы фермента путем оценки вероятности безизлучательного перехода между его термами.

9. Построена базовая модель распада димера на поверхности наночастицы с учетом роли поверхностных состояний электрона и найден механизм распада димера от соотношения уровней энергии ВЗМО и НСМО димера и уровня энергии поверхностного состояния электрона наночастицы;

10. В фундаментальном аспекте указаны на нарушения принципа Кюри-Пригожина в неравновесных условиях, возможность сосуществования фаз (теорема Ландау) и локализации электронов (теорема Андерсона) в квазиодномерных нанофрактальных объектах.

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

**INSTITUTE OF THE POLYMER CHEMISTRY AND PHYSICS
ANDIJAN STATE UNIVERSITY
ANDIJAN MACHINES BUILDING INSTITUTE**

ASQAROV BAHODIRJON

**SYNERGETIC MODELING OF SELF-ORGANIZATION PROCESSES IN POLYMER
NANOSYSTEMS ON THE BASE OF THE VIBRONICAL CONCEPTIONS**

**01.04.06 - Physics of Polymers and 02.00.12 - Nanochemistry, Nanophysics and Nanotechnology
(The Doctor of Physics and Mathematics Science)**

**DISSERTATION ABSTRACT FOR THE DOCTOR
OF PHYSICS AND MATHEMATICS SCIENCES (DSc)**

Tashkent-2021

The theme of the doctoral dissertation (DSc) is registered by the Supreme Attestation Commission under the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan in number B2021.1.DSc/FM173

The doctoral dissertation was carried out at the Institute of the Polymer Chemistry and Physics, Andijan State University and Andijan Machines Building Institute.

The abstract of the dissertation was posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website of scientific council at www.polechemphys.uz and on the website of "ZioNet" information and educational portal www.zionet.uz.

Scientific consultant: **Rashidova Sayora Sharafovna**
Doctor of chemical sciences, academician.

Oksengendler Boris Leonidovich
Doctor of physical and mathematical sciences, professor

Official opponents: **Mamudalimov Abdugafur Teshabuevich**
Doctor of physical and mathematical sciences, academician

Matrasulov Davron Urunovich
Doctor of physical and mathematical sciences, professor

Nechiporenko Yury Dmitrievich
Doctor of physical and mathematical sciences, professor.

Leading organization: **Tashkent State Technical University**

The defense of the dissertation will take place on "05" 11 2021 at "14"⁰⁰ o'clock at a meeting of 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 Kadiry str., 7^b, Ph.: (99871) 241-85-94, fax: (99871) 241-26-61, e-mail: polymer@academy.uz).

The dissertation can be reviewed at the Information Resource Center of Institute of the Polymer Chemistry and Physics (registration number 25) (Address, Abdulla Kadiry str. 7^b, 100128, Tashkent, Ph.: (99871) 241-85-94)

The abstract of the dissertation sent out on "22" October 2021 year.
(mailing report № 2 as of "22" October 2021)



N.R. Ashurov
Provisional Chairman of scientific council for
awarding the scientific degrees,
Doctor of technical science, professor

M.M. Usmanova
Provisional Scientific secretary of scientific council
for award of scientific degrees,
Candidate of chemical sciences, senior researcher

S.S. Negmatov
Provisional Chairman of scientific Seminar under
Scientific council for awarding the scientific degrees,
Doctor of technical sciences, academician

INTRODUCTION (abstract of DSc thesis)

The aim of the research work. Development of a new approach to the study of self-organization processes in the polymer nanosystems on the basis of synergy techniques and its application to the study of the properties of nanopolymeric systems and other nanoscale objects.

The objects of the research work. As the object of study is selected from the quasi-one macromolecule chain consisting of two types of monomer units and metal (d - type) nanoparticles.

Scientific novelty of the research work consists in the following:

It is for the first time of synergetic methods to solve the problem of determining the reactivity of macromolecular systems in nonequilibrium conditions and nanocatalysis problems.

Fractal illustrates the relationship of the molecular structure and surface electronic states of nano-objects with the processes of self-organization.

Built vibronical model and defined the control parameters of self-organization processes in fractal - nanoobjects with their approbation to polymer systems.

The possibility of self-management processes at the nanoscale by acting on the electronic subsystem of polymer systems.

Predict the effect of localization and delocalization of the structures along the atherosclerotic arteries.

The theoretical analysis on the definition of the amines in the exhaled air of the scenario intermittency.

The obtained results are of practical importance in solving management problems process of synthesis of various nanoobjects.

The developed models can be used in experimental studies polymers system properties, as well as new methods of diagnosis in medicine.

Implementation of the research results. There is an act of introduction issued by the Andijan State University named after Babur on the use of a special lecture in the course "nanophysics" development (the Act №360 from 14.05.2016). It shows that the synergistic effect between biochemical channels sugar metabolism and cholesterol synthesis gives low density lipoprotein that induce the development of atherosclerosis in the blood vessel volume by forming clusters from their long macromolecules. There is an ongoing discussion with doctors about the possibility of using this effect for the diagnosis of atherosclerosis in patients with diabetes.

The structure and volume of the thesis. The research work contains 195 pages of the text and consists of introduction, fifty chapters, conclusion, list of references and appendices.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

1. Аскарлов Б., Каримов. З. И., Эгамов Б. Ю. Особенности изменения летучих метаболитов некоторых аминов. Медицинский Журнал Узбекистана, 2010, №3, с. 47-50.

2. Аскарлов Б., Каримов.З. И., Эгамов Б. Ю. Анализ выдыхаемого воздуха и вопросы его применения в геронтологических исследованиях. Биологический Журнал Узбекистана, 2010, №3, с. 26-29.

3. Аскарлов Б., Каримов.З. И., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Рафикова З.Б. Исследования физиологических параметров организма на основе синергетического анализа флуктуации.«Вестник НУУз», 2011, специальный выпуск, с.153-155.

4. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Каримов З., Рафикова З.Б. О синергетическом подходе к понятию нормы патологии функционирования живых систем. Узбекский физический журнал, 2011, том 13, №2 с. 144-148.

5. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Каримов З.И., Синергетический подход к исследованию согласованной работы сердца и легких в норме и при ишемической болезни сердца. Медицинский Журнал Узбекистана, 2011, №2, с. 42-45.

6. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. Топологическое моделирование реакционной способности и биологической активности некоторых аминополисахаридов. Журнал структурной химии, 2011, том 52, № 4, с.798-801; Askarov B., Oksengendler B.L., Turaeva N.N., Rashidova S.Sh. Topological modeling of the reactive capacity and biological activity of some amino-polysaccharides. Journal of Structural Chemistry, 2011, 52:777. DOI: 10.1134/S0022476611040202. Translated from Zhurnal Strukturnoi Khimii, Vol.52, N4, p.798-801, July-August, 2011.

7. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. Квантовохимическое и топологическое исследование реакционной способности некоторых аминополисахаридов. // Доклады АН РУз, 2011, № 1. с. 49-51.

8. Аскарлов Б., Каримов.З. И., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Рафикова З.Б. Синергетический метод изучения некоторых физиологических характеристик функционирования живых систем в норме и патологии. Узбекский биологический журнал, 2011, №4, с.21-25.

9. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Азлярова М.А., Рашидова С.Ш. «Вибронная модель диссоциации двухатомной молекулы на поверхности твердого тела и нанокластера» Узбекский химический журнал, 2012, №4, с.11-15.

10. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Уролов И.З., Рашидова С.Ш. U-отрицательные физико-химические процессы и редукция

мастер - уравнений в синергетике. //Узбекский Физический Журнал, 2013, Vol. 15. № 3-4, С. 204-207.

11. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. Вибронная теория топологических реакций с участием петлевых конформаций биополимеров. Узбекский биологический журнал, 2013, №2, с.7-11.

12. Тураева Н.Н., Оксенгендлер Б.Л., Аскарлов Б., Азимов Ж.Т., Рашидова С.Ш. Синергетический подход к полидисперсности полимеров. Журнал ВМС, сер. Б, 2013, т.55, №1, с.111-113; Turaeva N.N., Oksengendler B.L., Askarov B., Azimov J.T., Rashidova S.Sh. A synergistic Approach to the Polidispersity of Polymers. Polymer Science, Ser. B, 2013, Vol.55, N 1-2, p.52-54.

13. Оксенгендлер Б.Л., Аскарлов Б., Никифоров В.Н., Роль конфайнмента электронов в формировании поверхностных уровней Тамма в наночастицах. Журнал технической физики, издательство: Наука. Санкт-Петербургское отделение (СПб.), 2014, том 84, №10, с. 156-158; Oksengendler B.L, Askarov B., Nikiforov V.N. Role of Electron Confinement in the Formation of Tamm Surface Levels in Nanoparticles. Technical Physics, Maik Nauka/Interperiodica Publishing (Russian Federation), 2014, vol. 59, N 10, p.1573-1575

14. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б. Л., Каримов З.И., Тураева Н.Н., Синергетическая модель аритмии сердца. Узбекский биологический журнал, №2, 2014, с. 6-7.

15. Аскарлов Б., Жураев З.Б., Атабаев О.М. Синергетическое моделирование процесса сокращения мышц. Узбекский Биологический Журнал, 2019, № 6, С. 13-14.

16. Зайнабидинов С., Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Иванов Н.В. Вибронная трактовка нелинейная кинетика процессов самоорганизации в наносистемах. Вестник АДУ, 2019, с.14.18.

17. Зайнабидинов С., Аскарлов Б. Акбаров Ш. Синергетическое моделирование процессов роста наноструктур в объеме мезофазы кремния и германия. Вестник АДУ, 2020, №1, с. 95-99.

П бўлим (II часть; partII)

19. Аскарлов Б., Пожаров С.Л. Авторское свидетельство № 1671350 на изобретение: “Способ контроля процесса помола в шаровой мельнице” Зарегистрировано в Государственном реестре изобретений СССР 22 апреля 1991 года.

20. Аскарлов Б., Пожаров С.Л. /Моделирование неравновесной химической кинетики плазмы кислородно-азотных смесей с примесью паров воды. Алгоритмы. Ташкент: ФАН, АН РУз НИС, вып., 77, 1993 с. 34-47.

21. Аскарлов Б. Способ диагностики болезни триметиламинурия. Рационализаторское предложение № 2092, от 15.04.2008.

22. Аскарлов Б. Способ определения аминов в биологических жидкостях. Рационализаторское предложение № 2093, от 15.04.2008.

III бўлим (III часть; partIII)

23. Аскарлов Б. К вопросу моделирования некоторых биомедицинских процессов. 5 – Республиканская конференция по физической электронике, Ташкент: 2009, с.155.

24. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н. Особенности катализа химической реакции на поверхности нанокластера: вибронный подход. В материалах V Всероссийской конференции «Физико-химические процессы в конденсированных средах и на межфазных границах». Воронеж: Научная книга, 2010, том II, 3с.

25. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Усманова М.М. Вибронная теория на наноструктурах. В программе Евразийского симпозиума по инновациям в катализе и электрохимии посвященного 100-летию академика Сокольского Д.В., Алматы:2010, 26-28 мая, pp-103.

26. Askarov B., Oksengendler B.L., Turaeva N.N., Milusheva R.Yu., Rashidova S. Sh. Quantum chemical vibronic theory of biological activity of chitosan and its derivatives. // In Proceedings 10-th International Conference of the European Chitin Society, Advances in chitin science, 2011, Volume XI, Editors: Valery Varlamov, Svetlana Bratskaya, Irina Yakovleva, Sevda Senel , Saint-Petersburg, Russia, p. 16-19.

27. Askarov B., Turaeva N.N., Oksengendler B.L., Milusheva R. Yu., Rashidova S.S., / Quantum chemical vibronic theory of biological activity of chitosan and its derivatives. // 10th international conference of the European chitin society, "EUCHIS" 11, Санкт-Петербург, Россия, Май 20-24, 2011, pol-7, с. 83.

28. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Милушева Р.Ю., Рашидова С.Ш. Вибронная теория реакционной способности и биологической активности хитозана и его производных // В трудах ИХФП АНРУз, Ташкент: ИХФП, 2011, с. 261-262.

29. Аскарлов Б., Каримов З.И., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Синергетический подход к исследованию функционирования биологического объекта на основе корреляционного анализа временного ряда физиологических параметров. Сборник тезисов докладов НПК «Проблемы ботаники, биоэкологии, физиологи и биохимии растений», НУУз, 2011, с. 18-19.

30. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б. Л., Тураева Н.Н., Милушева Р.Ю. Рашидова С.Ш. Топологическое моделирование реакций замещения на поверхности нанокластера. В сборнике тезисов докладов Российского конгресса по катализу «РОСКАТАЛИЗ», Новосибирск: ИК СО РАН, 2012, том II, СД-I-10.

31. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Иванова Е.К., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. О влиянии петлеобразования биомакромолекул на длину электронной Андерсоновской локализации. В материалах Международной научно-практической конференции "Актуальные проблемы науки о

полимерах". Ташкент, Институт химии и физики полимеров АН РУз, 5-7 ноября, 2013, с.21-22.

32. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. Вибронно-стимулированные реакции в твердой фазе. В материалах международной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», посвященной 70-летию физико-технического института. Ташкент, ФТИ НПО «Физика-Солнце» АНРУз., 14-15 ноября 2013, с. 85-87.

33. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Рашидова С.Ш. Моделирование топологических реакций в полимерах: вибранные аспекты. В материалах Международной научно-практической конференции "Актуальные проблемы науки о полимерах" Ташкент, Институт химии и физики полимеров АН РУз, 5-7 ноября, 2013, с. 19-20.

Автореферат “Илмий хабарнома: Физика-математика тадқиқотлари”
журнали таҳририятида таҳрирдан ўтказилиб, ўзбек, рус ва инглиз
тилларидаги матнлар ўзаро мувофиқлаштирилди.

Босишга рухсат этилди 21.10.2021 йил
Бичим 60x841/16. “Times New Roman”
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.
Шартли босма табоғи: 3,75. Адади 50. Буюртма № 143.

Ўзбекистон Миллий университети босмахонасида босилди.
Тошкент, Талабалар шаҳарчаси, ЎЗМУ.

