НОВАЯ ЭРА НАУКИ И ЗНАНИЙ
МЕЖДУНАРОДНЫЙ НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
global-science-review.com
editor@global-science-review.com

МЕТАЛЛ ОКСИД НАНОКОМПОЗИТЛАРИНИНГ АДСОРБСИЯ ВА ФОТОКАТАЛИЗ ЖАРАЁНЛАРИДАГИ САМАРАДОРЛИГИ: НАЗАРИЙ АСОСЛАР, СТРУКТУРА-ХОССА БОҒЛИҚЛИГИ ВА АМАЛИЙ ИСТИҚБОЛЛАР

Мардонова Зухра Шуҳрат қизи

Чулиёв Худоёр Шуҳрат ўғли

АННОТАЦИЯ.

Мазкур мақолада металл оксид нанокомпозитларининг адсорбсия ва фотокатализ жараёнларидаги самарадорлиги замонавий ноорганик кимё, сирт кимёси, наноматериалшунослик ва экологик технологиялар нуқтаи назаридан кенгайтирилган ҳолда таҳлил қилинади. Дастлабки ишда баён қилинган металл оксидларининг оддий оксидлардан наноўлчамли композит тизимларгача бўлган тарихий ривожланиш ғояси сақланган ҳолда, ушбу вариантда материалларнинг структуравий, морфологик, сирт ва электрон хусусиятлари билан функционал фаоллиги ўртасидаги боғлиқлик чуқурлаштирилади. Адсорбсия жараёнида солиштирма сирт майдони, ғоваклик, сирт заряди, функционал гуруҳлар ва адсорбатнинг физик-кимёвий хусусиятлари; фотокатализда эса band-gap, электрон-ковак жуфтларининг ҳосил бўлиши, миграцияси, рекомбинацияси ва реактив кислород турларининг шаклланиши асосий омиллар сифатида кўриб чиқилади. TiO_2, ZnO, Fe_2O_3, CuO ва уларнинг гетеротузилмалари мисолида компонентлараро интерфейсни бошқариш, heterojunction ҳосил қилиш, ёруғликдан фойдаланиш диапазонини кенгайтириш ва заряд ташувчиларни фазовий ажратишнинг аҳамияти ёритилади. Шунингдек, sol-gel, гидротермал, чўктириш ва бошқа синтез ёндашувларининг материал хоссаларига таъсири, XRD, SEM/TEM, BET, XPS, FTIR, UV-Vis DRS, PL ва электрохимик усуллар ёрдамида комплекс тавсифлаш зарурати асосланади. Адсорбсия ва фотокатализнинг кетма-кет ёки

синергик ишлаши сувдаги органик ифлослантирувчиларни аввал концентрациялаш, кейин эса оксидловчи жараёнлар орқали парчалаш имконини беради. Шу билан бирга, лаборатория шароитидаги натижаларни реал сув тизимларига кўчириш, катализаторни ажратиш ва қайта ишлатиш, оралиқ маҳсулотларни назорат қилиш, иккиламчи ифлосланиш хавфи ва технологик иқтисодийлик каби муаммолар алоҳида муҳокама қилинади. Мақола келгусидаги PhD тадқиқотлари учун материал таркиби-структураси-сирт хоссаси-заряд ташилиши-адсорбсия-фотокаталитик кинетика-минерализация занжирини ягона тадқиқот концепцияси сифатида таклиф этади.

Калит сўзлар: металл оксид нанокомпозитлари; адсорбсия; фотокатализ; TiO_2; ZnO; Fe_2O_3; CuO; heterojunction; S-scheme; Z-scheme; сирт фаол марказлари; band-gap; реактив кислород турлари; фотодеградация; сувни тозалаш; наноматериаллар.

КИРИШ

Дастлабки мақолада металл оксид нанокомпозитлари адсорбсия ва фотокатализдаги истиқболли материаллар сифатида кўрсатилган ҳамда мавзунинг тарихий ривожланиши XIX аср охиридан замонавий наноматериалларгача кузатилган. Унда TiO_2, ZnO ва Fe_2O_3 каби оксидлар, уларнинг аралашмалари ҳамда экологик муаммоларни ҳал қилишдаги имкониятлари асосий мисоллар сифатида берилган. Мазкур кенгайтирилган вариант ушбу мазмунни сақлаб, уни докторантура даражасида муҳокама қилиш учун фундаментал механизмлар, экспериментал ёндашувлар ва илмий муаммолар билан бойитади.

Бугунги кунда сувнинг органик бўёқлар, фармацевтик қолдиқлар, пестицидлар ва бошқа барқарор ифлослантирувчилар билан ифлосланиши уларни оддий механик ажратишдан кўра чуқурроқ кимёвий қайта ишлашни талаб қиладиган ҳолатларни юзага келтирмоқда. Адсорбсия

ифлослантирувчини қаттиқ сиртга ўтказиш орқали концентрациялашга имкон беради, фотокатализ эса ёруғлик энергияси ёрдамида кимёвий трансформацияни амалга оширади. Шу икки жараённи битта функционал нанокомпозитда уйғунлаштириш ифлослантирувчини ушлаш ва кейинчалик парчалашни бир тизимда олиб бориш имкониятини яратади.

Мақоланинг мақсади — металл оксид нанокомпозитларининг адсорбсия ва фотокатализдаги самарадорлигини белгиловчи омилларни тизимлаштириш, уларнинг ривожланиш мантиғини тушунтириш, материал дизайни ва жараён параметрларининг ўзаро боғлиқлигини очиб бериш ҳамда PhD даражасидаги кейинги экспериментал тадқиқот учун методологик асос яратиш.

АСОСИЙ КИСИМ

Тадқиқотнинг долзарблиги**.** Мавзунинг долзарблиги учта ўзаро боғлиқ омил билан белгиланади: биринчидан, сув ва ҳаво муҳитида мураккаб ифлослантирувчилар сонининг ортиши; иккинчидан, юқори фаол, барқарор ва қайта ишлатиладиган каталитик материалларга эҳтиёж; учинчидан, наноўлчамда сирт ва электрон хоссаларни бошқариш орқали материал самарадорлигини ошириш имкониятининг пайдо бўлиши.

Нанокомпозитларнинг афзаллиги фақат заррача ўлчамининг кичиклигида эмас, балки бир нечта компонентнинг ўзаро таъсири натижасида янги интерфейс ва фаол марказларнинг шаклланишидадир.

Тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари-металл оксид нанокомпозитларининг адсорбсия ва фотокатализдаги функционал хоссаларини тизимли таҳлил қилиш;

- материал таркиби, кристалл фаза, морфология, сирт майдони ва электрон тузилманинг фаолликка таъсирини аниқлаш;

- адсорбсия ва фотокатализнинг алоҳида ҳамда синергик механизмларини тавсифлаш;

- heterojunction ва интерфейс муҳандислигининг заряд ташувчилар динамикасидаги ролини тушунтириш;

- кинетик ва изотермик моделларни қўллашнинг методологик жиҳатларини кўрсатиш;

- реал сув тизимларига ўтишда юзага келадиган техник ва экологик муаммоларни белгилаш;

- келгусидаги PhD тадқиқоти учун экспериментал концепция ва назорат тажрибаларини шакллантириш.

МЕТАЛЛ ОКСИД НАНОКОМПОЗИТЛАРИНИНГ ИЛМИЙ РИВОЖЛАНИШИ. Металл оксидларининг дастлабки тадқиқотлари уларнинг кимёвий барқарорлиги, кислота-асос хоссалари, оксидланиш-қайтарилиш реакцияларидаги хатти-ҳаракатлари ва кристалл тузилишини ўрганишга қаратилган. Кейинчалик сирт ҳодисаларининг катализдаги ўрни аниқланиб, адсорбсия жараёни реакцияга киришувчи моддаларнинг катализатор сиртига етиб бориши ва фаол марказлар билан ўзаро таъсирининг зарур босқичи сифатида қарала бошланди.

Наноўлчамли материалларнинг ривожланиши билан сирт/ҳажм нисбати сезиларли даражада ошди. Натижада бир хил кимёвий таркибга эга бўлган материал турли заррача ўлчами ёки кристалл морфологиясида мутлақо бошқа адсорбцион ва фотокаталитик хатти-ҳаракат кўрсатиши мумкинлиги аён бўлди. Шунинг учун замонавий наноматериалшуносликда «таркиб» тушунчаси билан бир қаторда «структуравий ҳолат» ва «сирт ҳолати» ҳам материалнинг асосий идентификацион белгиларидан ҳисобланади.

Дастлабки файлда келтирилган тарихий кетма-кетликда 1960-йиллардан бошлаб TiO_2 ва ZnO асосидаги наноструктурали материалларга қизиқиш кучайгани, 1990-йилларда эса бир нечта оксидларни бирлаштириш орқали композитлар яратиш кенгайгани қайд этилган. Бу тарихий йўналиш замонавий

тадқиқотларда гетероинтерфейс, заряд ташувчилар ва сирт нуқсонларини бошқариш каби масалаларга олиб келди.

МЕТАЛЛ ОКСИДЛАРНИНГ АДСОРБЦИОН ХОССАЛАРИ

Адсорбсия механизми. Адсорбсия газ ёки эритма фазасидаги компонентларнинг қаттиқ модда сиртида тўпланишидир. Металл оксид нанокомпозитларида адсорбсия самарадорлиги сиртнинг энергетик бир жинслилиги, функционал гуруҳлар, гидроксил марказлари, ғоваклик, сирт заряди ва адсорбат молекуласининг қутбланиш хусусиятлари билан белгиланади. Физик адсорбсияда нисбатан кучсиз молекулалараро ўзаро таъсирлар, кимёвий адсорбсияда эса сирт марказлари билан кучлироқ боғланиш ёки электрон алмашинуви устун бўлиши мумкин.

pH ва сирт зарядининг роли. Эритманинг pH қиймати металл оксид сиртидаги гидроксил гуруҳларининг протонланиши ёки депротонланишига таъсир қилади. Шу сабабли бир хил адсорбент турли pH шароитида турли сирт зарядига эга бўлиши мумкин. Адсорбат ионланган ҳолда мавжуд бўлса, электростатик тортишиш ёки итарилиш адсорбсия сиғимини сезиларли ўзгартиради. Демак, pH фақат ёрдамчи параметр эмас, балки адсорбсия механизмининг муҳим бошқарувчиси ҳисобланади.

Адсорбсия изотермалари. Мувозанат маълумотларини талқин қилишда Langmuir ва Freundlich моделларидан фойдаланиш мумкин. Langmuir модели энергетик жиҳатдан бир хил марказларда моноқатламли адсорбсия ғоясига асосланади. Freundlich модели эса сиртнинг гетерогенлигини ҳисобга олади. Бироқ модел танлашда фақат R^2 қиймати билан чекланмасдан, параметрларнинг физик маъноси, ишонч оралиғи, қолдиқ хатолар ва тажриба диапазони ҳам кўриб чиқилиши керак.

Langmuir тенгламасининг кенг қўлланадиган кўриниши:

$$qe = (qmax \cdot KL \cdot Ce)/(1 + KL \cdot Ce).$$

Бу ерда qe — мувозанатдаги адсорбсия сиғими, qmax — максимал моноқатламли сиғим, KL — Langmuir константаси, Ce — мувозанат концентрацияси.

Freundlich модели:

qe = KF · Ce^(1/n).

Бу модель сиртнинг энергетик гетерогенлиги ва адсорбсия интенсивлигини тавсифлаш учун ишлатилади.

ФОТОКАТАЛИЗНИНГ ФУНДАМЕНТАЛ АСОСЛАРИ

Яримўтказгич фотокатализатор ёруғлик квантиини ютганда валент зона электронлари юқори энергетик ҳолатга кўтарилиб, ўтказувчанлик зонасида электрон ва валент зонада ковак ҳосил бўлиши мумкин. Ушбу заряд ташувчилар ҳажм ичида ва сирт томон ҳаракатланади. Уларнинг бир қисми рекомбинацияга учраса, қолган қисми сиртга етиб бориб оксидланиш-қайтарилиш реакцияларида қатнашади.

Fujishima ва Honda томонидан 1972-йилда TiO_2 электродида фотоэлектрокимёвий сув парчаланиши намойиш этилгани яримўтказгич фотокимёсининг муҳим тарихий босқичидир. Кейинчалик TiO_2 нинг экологик фотокатализдаги қўлланилиши кенгайди. Бироқ TiO_2 нинг ёруғлик спектридан фойдаланиши ва электрон-ковак рекомбинацияси билан боғлиқ чекловлар уни модификациялаш стратегияларини ривожлантиришга туртки берди.

Реактив кислород турлари**.** Фотокаталитик сирт реакцияларида гидроксил радикали, супероксид радикали ва бошқа фаол заррачалар ҳосил бўлиши мумкин. Уларнинг нисбий ҳиссаси катализаторнинг band тузилиши, сирт кимёси, кислород мавжудлиги, pH ва адсорбат табиатига боғлиқ. Шу сабабли механизмни тасдиқлаш учун фақат маҳсулот концентрациясининг камайиши эмас, балки scavenger тажрибалари ва инструментал далиллар ҳам талаб қилинади.

Фотодеградация ва минерализация фарқи Органик бўёқнинг рангсизланиши молекула тўлиқ минерализацияланганини англатмайди. Катта органик молекула аввал кичикроқ оралиқ маҳсулотларга айланиши мумкин. Шу сабабли юқори илмий даражадаги тадқиқотларда умумий органик углерод (TOC), хроматографик таҳлил ёки масс-спектрометрик ёндашувлар орқали якуний натижани текшириш мақсадга мувофиқ.

TiO_2, ZnO, Fe_2O_3 ВА CuO АСОСИДАГИ ТИЗИМЛАР TiO_2 кимёвий барқарорлиги ва фотокаталитик фаоллиги сабабли энг кўп ўрганилган яримўтказгичлардан биридир. ZnO ҳам юқори электрон ҳаракатчанлиги, сирт хусусиятлари ва фотокаталитик имкониятлари билан қизиқиш уйғотади. Fe_2O_3 кўринадиган ёруғлик соҳасида ютилиш хусусиятига эга бўлиб, айрим композитларда электрон тузилмани ўзгартириш учун ишлатилади. CuO эса нисбатан тор band-gap ли компонент сифатида гетеротузилмалар ва p-n контактлар яратишда қизиқарли ҳисобланади.

Бироқ ҳар бир оксиднинг афзаллиги унинг айрим чекловлари билан бирга мавжуд. Масалан, юқори фаоллик материалнинг фотокоррозияга чидамлилиги ёки қайта ишлатилиши билан мос келмаслиги мумкин. Шунинг учун PhD тадқиқотида «энг фаол материал» тушунчасини фақат битта ифлослантирувчи бўйича парчаланиш фоизи билан белгилашдан кўра, фаоллик, селективлик, барқарорлик, қайта ишлатилиш ва хавфсизликни биргаликда баҳолаш мақсадга мувофиқ.

HETEROJUNCTION ВА ИНТЕРФЕЙС МУҲАНДИСЛИГИ

Икки яримўтказгич ёки металл ва яримўтказгич ўртасида ҳосил бўладиган интерфейс заряд ташувчилар ҳаракатининг энергетик йўлини ўзгартириши мумкин. Type-II heterojunctionда электрон ва ковакларнинг турли компонентларга йўналиши заряд ажралишини кучайтириши мумкин, аммо айрим ҳолларда кучли redox потенциалининг пасайиши эҳтимоли мавжуд. Z-scheme ва S-scheme концепциялари эса юқори оксидланиш-қайтарилиш

қобилиятини сақлаш билан бирга зарядларни самаралироқ ажратишни тушунтиришга қаратилган.

Heterojunctionнинг реал мавжудлигини фақат фотокаталитик натижа билан тасдиқлаш етарли эмас. XPS силжишлари, Mott-Schottky таҳлили, PL, вақт бўйича фотолюминесценция, электрохимик импеданс ва фаол тур scavenger тажрибалари каби усуллар биргаликда қўлланганда интерфейс механизми ҳақида ишончлироқ хулоса чиқариш мумкин.

НАНОКОМПОЗИТЛАРНИ СИНТЕЗ ҚИЛИШ

Sol-gel усули. Sol-gel усули прекурсорларни молекуляр даражада аралаштириш ва кейинчалик гидролиз, конденсация, қуритиш ҳамда термик ишлов бериш орқали оксид тармоғини ҳосил қилишга асосланади. Унинг афзаллиги компонентлар нисбатини бошқариш ва нисбатан бир жинсли материал олиш имкониятидир. Бироқ қуритиш ва кальцинация шароитлари агломерация ва кристалл ўсишига олиб келиши мумкин.

Гидротермал ва solvotermal синтез. Гидротермал/solvotermal усуллар кристалл морфологияни ва заррача ўлчамини бошқаришда қўл келади. Ҳарорат, босим, минерализатор, прекурсор концентрацияси ва вақтнинг ўзгариши нанород, наносфера, нанопластинка ёки бошқа морфологияларни шакллантириши мумкин.

Чўктириш ва импегнация. Чўктириш усули содда ва нисбатан арзон бўлиб, катта ҳажмдаги материаллар учун қулай бўлиши мумкин. Импрегнация эса фаол компонентни олдиндан тайёрланган ташувчи ёки оксид сиртига жойлаштириш имконини беради. Ҳар икки ҳолатда ҳам компонентлараро контакт сифати ва фаол фазаларнинг бир текис тақсимланиши якуний фаоллик учун муҳимдир.

СТРУКТУРА ВА СИРТНИ ТАВСИФЛАШ

Нанокомпозитнинг юқори фаоллигини илмий асослаш учун комплекс тавсифлаш талаб қилинади. XRD кристалл фаза ва кристалликни, SEM ва TEM

морфологияни, EDS элемент таркибини, BET эса солиштирма сирт майдони ва ғовакликни баҳолайди. XPS сиртнинг кимёвий ҳолати ва оксидланиш даражаларини аниқлашда, FTIR функционал гуруҳларни ўрганишда, UV-Vis DRS оптик ютилиш чегарасини баҳолашда, PL эса рекомбинация жараёнларини таҳлил қилишда қўлланиши мумкин.

- XRD — фаза таркиби, кристаллик ва кристаллит ўлчамини баҳолаш;
- SEM/TEM — морфология, заррача ўлчами ва интерфейсни кўриш;
- BET — солиштирма сирт майдони ва ғоваклик;
- XPS — сирт элементлари ва кимёвий оксидланиш ҳолати;
- FTIR — сирт функционал гуруҳлари;
- UV-Vis DRS — оптик ютилиш ва band-gap ни баҳолаш;
- PL — электрон-ковак рекомбинацияси ҳақида маълумот;
- EIS ва Mott-Schottky — заряд узатиш ва яримўтказгич параметрларини таҳлил қилиш.

АДСОРБСИЯ ВА ФОТОКАТАЛИЗНИНГ ИНТЕГРАЦИЯСИ

Адсорбсия-фотокатализ гибрид тизимида адсорбсия босқичи ифлослантирувчини катализатор сиртига яқинлаштиради. Кейинги фотокаталитик босқичда ҳосил бўлган фаол заррачалар сиртга адсорбцияланган молекулалар билан тезроқ реакцияга киришиши мумкин. Шу нуқтаи назардан, юқори сирт майдони ва юқори фотокаталитик фаолликнинг бир материалда уйғунлашуви синергик самарани юзага келтириши мумкин.

Аммо синергия ҳақидаги хулоса алоҳида назоратлар билан исботланиши керак. Қоронғуликдаги адсорбсия, фақат ёруғликдаги фотолиз, фақат катализаторли тизим ва композит тизим натижаларини солиштириш орқали ҳар бир механизмнинг ҳиссаси ажратилади. Бундай назоратлар бўлмаса, адсорбсия ҳисобига содир бўлган концентрация камайишини фотокаталитик парчаланиш деб талқин қилиш хавфи мавжуд.

ФОТОКАТАЛИТИК КИНЕТИКА. Фотокаталитик жараёнларни кинетик жиҳатдан баҳолашда кўпинча кўринма биринчи тартибли модел қўлланади:

$$\ln(C_0/Ct) = kapp \cdot t.$$

Бу модел фақат мос тажриба шароитида ишлатилиши ва моделнинг қўлланиш чегараси кўрсатилиши керак. Турли мақолалардаги kapp қийматларини тўғридан-тўғри таққослашда реактор тури, ёруғлик манбаи, фотон оқими, катализатор массаси, бошланғич концентрация, pH ва масса узатиш шароитлари ҳисобга олинади.

Юқори илмий сифатдаги ишда кинетик параметр билан бирга материалнинг фотон самарадорлиги, қайта ишлатилиш барқарорлиги ва минерализация даражаси ҳам кўрсатилиши мақсадга мувофиқ. Акс ҳолда жуда тез рангсизланиш юқори умумий экологик самарадорликни англатмаслиги мумкин.

ТАЖРИБА ДИЗАЙНИ УЧУН ТАКЛИФ ЭТИЛАДИГАН КОНЦЕПЦИЯ. Агар ушбу мавзу асосида экспериментал тадқиқот олиб борилса, тажрибани бир нечта кетма-кет босқичга ажратиш мақсадга мувофиқ. Аввал бир компонентли TiO_2 ёки ZnO назорат материали олинади. Кейин иккинчи металл оксиднинг турли улушлари билан композитлар тайёрланади. Ҳар бир намуна структуравий ва сирт усуллари билан тавсифланади. Кейинги босқичда адсорбсия мувозанати, фотокаталитик кинетика, pH таъсири, катализатор дозаси ва ёруғлик шароитлари ўрганилади.

- 1-босқич: назорат оксидларини синтез қилиш ва тавсифлаш;
- 2-босқич: компонентлар нисбатини ўзгартириб нанокомпозитлар олиш;
- 3-босқич: XRD, SEM/TEM, BET, XPS, FTIR, UV-Vis DRS ва PL орқали тавсифлаш;
- 4-босқич: қоронғуликдаги адсорбсия мувозанатини аниқлаш;

- 5-босқич: фотокаталитик парчаланиш тажрибаларини стандартлаштириш;

- 6-босқич: pH, бошланғич концентрация, катализатор дозаси ва ёруғлик параметрларини оптималлаштириш;

- 7-босқич: оралиқ маҳсулотлар ва минерализацияни текшириш;

- 8-босқич: қайта ишлатиш цикллари ва катализаторнинг барқарорлигини баҳолаш.

НАТИЖАЛАРНИ СТАТИСТИК ВА ИЛМИЙ ИШОНЧЛИЛИК БИЛАН БАҲОЛАШ

Тадқиқотда тажриба натижаларини камида такрорий ўлчаш, ўртача қиймат ва тарқалиш кўрсаткичларини бериш, зарур ҳолларда статистик тестлардан фойдаланиш муҳим. Бир марталик тажриба асосида материаллар ўртасида қатъий хулоса чиқариш ишончлиликни пасайтиради. Тажриба протоколининг бир хил бўлиши, blank ва назорат гуруҳларининг мавжудлиги ҳамда аналитик усулнинг аниқлик чегараси кўрсатилиши керак.

Айниқса фотокаталитик тажрибаларда ёруғлик манбаи ва реактор геометрияси натижага кучли таъсир қилиши мумкин. Шунинг учун «20 дақиқада 90% парчаланиш» каби кўрсаткич фақат тажриба шароитлари билан бирга берилгандагина илмий жиҳатдан мазмунли бўлади. Дастлабки файлда ZnO/TiO_2 ва метилен кўки бўйича 15–20 дақиқада 90% дан ортиқ парчаланиш ҳақидаги аниқ рақам келтирилган; бундай рақамни якуний PhD мақоласига киритишдан олдин бирламчи мақола билан қайта текшириш зарур.

РЕАЛ СУВ ТИЗИМЛАРИДА ҚЎЛЛАШ МУАММОЛАРИ

Лаборатория шароитида тайёрланган синтетик эритма реал сувнинг мураккаб таркибини тўлиқ акс эттирмайди. Реал сувда карбонат, хлорид, сульфат, фосфат ионлари, табиий органик моддалар ва бошқа аралашмалар мавжуд бўлиши мумкин. Улар катализатор сиртидаги фаол марказлар билан

рақобатлашиши, ёруғликни ютиши ёки реактив кислород турларини ушлаши мумкин.

Бундан ташқари, нанокомпозитни сувдан ажратиш масаласи технологик жиҳатдан муҳим. Жуда кичик заррачалар юқори фаоллик бериши мумкин, аммо уларни фильтрация ёки седиментация орқали ажратиш қийинлашади. Шу сабабли магнит компонентлар билан композитлаш, иммобилизация, мембрана билан бирлаштириш ёки йирикроқ иккиламчи ташувчиларга жойлаштириш каби ёндашувлар амалиёт учун қизиқарли.

ЭКОЛОГИК ХАВФСИЗЛИК ВА НАНОМАТЕРИАЛЛАРНИНГ ТАҚДИРИ . Наноматериалнинг юқори самарадорлиги унинг экологик хавфсизлиги билан автоматик равишда тенг эмас. Катализаторнинг ўзи сувга ажралиб чиқиши, узоқ муддатли қўлланишда структураси ўзгариши ёки қайта ишлатиш жараёнида фаоллик пасайиши мумкин. Шунинг учун PhD тадқиқотида нафақат ифлослантирувчининг камайиши, балки катализаторнинг ўзи тизимда қандай тақсимланиши ва ишловдан кейин қандай ҳолатда қолиши ҳам ўрганилиши лозим.

Шунингдек, деградация маҳсулотларининг токсиклигини баҳолаш муҳим. Асосий молекула камайган бўлса-да, оралиқ маҳсулотлар биологик жиҳатдан фаол бўлиши мумкин. Шу сабабли фақат UV-Vis ранг ўзгариши билан экологик хавфсизлик ҳақида якуний хулоса чиқариш методологик жиҳатдан етарли эмас.

ИЛМИЙ ЯНГИЛИКНИ ШАКЛЛАНТИРИШ ИМКОНИЯТЛАРИ. Мазкур йўналишда PhD даражасидаги илмий янгиликни фақат «янги нанокомпозит олинди» шаклида ифодалашдан кўра, материалнинг янги хоссаси ва унинг механизмини асослаш кучлироқ илмий натижа беради. Масалан, маълум компонент нисбатида интерфейс заряд ташиш механизмининг ўзгариши, адсорбсия ва фотокатализнинг синергик коэффициентини аниқлаш, реал сув матрицасида барқарорликни кўрсатиш

ёки қайта ишлатиш цикларида структуравий ўзгаришларни аниқлаш илмий янгиликни кучайтириши мумкин.

- компонентлар нисбатининг сирт ва электрон хоссаларга таъсирини аниқлаш;

- гетероинтерфейс ҳосил бўлиши билан фотокаталитик фаоллик ўртасидаги сабабий боғлиқликни исботлаш;

- адсорбсия ва фотокатализ ҳиссасини алоҳида ва биргаликда миқдорий баҳолаш;

- оптимал синтез шароитларини статистик ёки математик оптималлаштириш;

- қайта ишлатиш давомида фаол марказлар ва кристалл фазасининг ўзгаришини аниқлаш;

- реал сув шароитида композитнинг ишлаш самарадорлиги ва хавфсизлигини баҳолаш.

Дастлабки мақоладаги тарихий ёндашув металл оксид нанокомпозитларининг ривожланишини оддий оксидлардан кўп компонентли наноструктураларгача кузатиш имконини беради. Кенгайтирилган таҳлил шуни кўрсатадики, ушбу эволюция фақат технологик мураккаблашув эмас. Асосий ўзгариш материалнинг «кимёвий формуласи»дан унинг «интерфейс ва сирт архитектураси»ни бошқаришга ўтишдир.

Бугунги тадқиқотларда юқори самарадорлик учун бир нечта параметр бир вақтда оптималлаштирилади: сирт майдони, band-gap, заряд ташувчиларнинг умр давомийлиги, адсорбатга мойиллик, redox потенциал, сувли муҳитдаги барқарорлик ва қайта ишлатиш имконияти. Шу сабабли фақат битта кўрсаткич бўйича энг юқори натижани олган материални универсал равишда энг самарали деб баҳолаш илмий жиҳатдан тўғри эмас. Материални баҳолаш кўп мезонли бўлиши керак.

Шунингдек, адсорбсия ва фотокатализни бирлаштиришнинг асосий илмий афзаллиги икки хил функциянинг бир сиртга жамланишидир: адсорбсия ифлослантирувчини ушлаб туради, фотокатализ эса уни кимёвий ўзгартиради. Бироқ бу икки жараён ўзаро рақобат қилиши ҳам мумкин. Кучли адсорбсия молекулани сиртга маҳкам боғлаб, кейинги десорбсия ёки реакция босқичини секинлаштириши мумкин. Демак, оптимал материал «энг катта адсорбсия» ёки «энг катта фотокатализ» эмас, балки иккала жараён ўртасидаги оптимал мувозанатни таъминловчи материал бўлиши мумкин.

КЕЛАЖАКДАГИ ТАДҚИҚОТ ЙЎНАЛИШЛАРИ

- кўринадиган ва қуёш нурланишидан самарали фойдаланадиган гетеротузилмаларни яратиш;

- интерфейс зарядларини бевосита спектроскопик ва электрохимик усуллар билан кузатиш;

- адсорбсия-фотокатализ синергиясини миқдорий ифодаловчи мезон ишлаб чиқиш;

- реал оқова сув ва саноат сувларида узоқ муддатли тажрибалар ўтказиш;

- нанокомпозитни қайта тиклаш ва камида бир неча циклда фаолликни сақлашни текшириш;

- фотокаталитик жараённинг оралиқ маҳсулотлари ва тўлиқ минерализациясини аниқлаш;

- материал синтезида чиқинди ва энергия сарфини камайтирувчи «яшил» ёндашувларни ривожлантириш;

- тажриба маълумотлари асосида математик моделлаштириш ва сунъий интеллект ёрдамида композиция оптималлаштириш.

ХУЛОСА

Металл оксид нанокомпозитларининг адсорбсия ва фотокатализ жараёнларидаги самарадорлиги уларнинг наноўлчамдаги сирт хусусиятлари, кристалл тузилиши, электрон энергетикаси ва компонентлараро

интерфейсининг ўзаро таъсири билан белгиланади. Дастлабки оддий оксидлардан замонавий гетеротузилмаларгача бўлган ривожланиш материалшунослигининг сиртни бошқариш ва заряд ташувчиларни йўналтиришга асосланган янги босқичини шакллантирди.

Адсорбсия ифлослантирувчини сиртга концентрациялашда, фотокатализ эса уни фаол оксидловчи-қайтарувчи заррачалар ёрдамида трансформация қилишда муҳимдир. Ушбу икки механизмнинг уйғунлашуви сув ва ҳаво муҳитини тозалаш учун истиқболли ёндашув бўлса-да, юқори илмий ишончлилик учун қоронғуликдаги адсорбсия, фотолиз, назорат катализатори, кинетика, минерализация ва қайта ишлатиш каби назоратлар мажбурий аҳамиятга эга.

Тадқиқот учун асосий илмий вазифа янги композитни шунчаки олиш эмас, балки унинг юқори самарадорлигини структуравий ва электрон механизмлар орқали исботлашдан иборат. Шу мақсадда «таркиб-структура-сирт-интерфейс-заряд ташилиши-адсорбсия-фотокатализ-минерализация-барқарорлик» занжири бўйича тизимли тадқиқот олиб бориш мақсадга мувофиқ. Бундай ёндашув мақолани назарий шарҳдан амалий ва экспериментал PhD тадқиқотига олиб ўтиш учун мустаҳкам асос яратади.

ФОЙДАЛАНИЛГАН АДАБИЁТЛАР

1. Металл оксидлар ва уларнинг композитлари ёрдамида органик ифлослантирувчиларни адсорбцион олиб ташлаш ва фотокаталитик парчаланиш бўйича комплекс шарҳ. Advances in Colloid and Interface Science, 272 (2019), 102009.

2. Qumar U., Hassan J.Z., Bhatti R.A. ва бошқалар. Photocatalysis vs adsorption by metal oxide nanoparticles. Journal of Materials Science & Technology, 131 (2022), 122–166.

3. Fujishima A., Honda K. Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode. Nature, 238 (1972), 37–38.

4. Kumar S.G., Devi L.G. Review on Modified TiO_2 Photocatalysis under UV/Visible Light. Journal of Physical Chemistry A, 115 (2011), 13211–13241.

5. Composite Titanium Dioxide Nanomaterials. Chemical Reviews, 114 (2014), 9853–9918.

6. Goktas S., Goktas A. A comparative study on recent progress in efficient ZnO based nanocomposite and heterojunction photocatalysts. Journal of Alloys and Compounds, 863 (2021), 158734.

7. A review of metal oxide-based Z-scheme heterojunction photocatalysts: actualities and developments. Materials Today Energy, 21 (2021), 100829.

8. Photocatalytic TiO_2/adsorbent nanocomposites prepared via wet chemical impregnation for wastewater treatment: A review. Applied Catalysis A: General (2009).

9. Advances in metal oxide composites for sustainable environmental remediation. Inorganic Chemistry Communications, 179 (2025), 114641.

10. Yadav S., Kaushik P., Dalal A. ва бошқалар. Sustainable water purification through hybrid adsorption photocatalyst composite: Past decade insight. Microchemical Journal, 226 (2026), 118201.