



UDK 537.226

**Jamoliddin RAZZOKOV,**

*O'zbekiston Milliy universiteti dotsenti, FATI katta ilmiy xodimi*

**Nilufar AXMEDOVA,**

*O'zbekiston Milliy universiteti magistranti*

*O'zbekiston Milliy universiteti dotsenti, PhD F.Turg'unbaev taqrizi asosida*

### SUV ARALASHMALI NATRIY BOROGIDRATLAR DIELEKTRIK XUSUSIYATLARI

Аннотация

Suv aralashmali natriy borogidratni dielektrik xususiyatlari molekulyar dinamik simulyatsiyasi yordamida tadqiq qilindi. Model sistemada suv va natriy borogidratning turli xil nisbatdagi konsentratsiyalaridan foydalanildi. Eritmalarning dielektrik singdiruvchanligi va ortiqcha dielektrik singdiruvchanligi qiymatlari hisoblandi. Eritmaning tarkibidagi suv va natriy borogidratning turli xil konsen-tratsiyalariga ko'ra dielektrik singdiruvchanligi taqqoslandi. Bu izlanishlar GROMACS dasturiy paketiyordamida amalga oshirildi. Olib borilgan tadqiqot-larga ko'ra, ortiqcha dielektrik konstanta qiymatlari natriy borogidridning  $x \sim 0.2$  mol konsentratsiyasida kuzatildi va unda natriy borogidrid-suv binar aralashmasi-da eng ko'p vodorod bog'iga ega bo'lgan geteromolekulyar strukturalar hosil bo'ldi.

**Kalit so'zlar:** Eritma, suv aralashmali natriy borogidrat, dielektrik singdiruvchanlik, vodorod.

### ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БОРГИДРИДА НАТРИЯ СМЕШАННОГО С ВОДОЙ

Аннотация

Диэлектрические свойства боргидрида натрия, смешанного с водой, были изучены с помощью моделирования молекулярной динамики. В модельной системе использовались различные концентрации воды и боргидрида натрия. Рассчитаны значения диэлектрической проницаемости и избыточной диэлектрической проницаемости растворов. Сравнивались диэлектрические параметры при различных концентрациях воды и боргидрида натрия в растворах. Эти исследования проводились с использованием пакета программ GROMACS. Согласно исследованиям, при  $x \sim 0,2$  мольных концен-трациях боргидрида натрия наблюдались избыточные значения диэлектрической проницаемости, а в бинарной смеси боргидрид натрия – вода образо-вывались гетеромолекулярные структуры с наибольшим числом водородных связей.

**Ключевые слова:** раствор, водорастворимый боргидрат натрия, диэлектрической проницаемости, водород.

### DIELECTRIC PROPERTIES OF SODIUM BOROHYDRIDE MIXED WITH WATER

Annotation

The dielectric properties of sodium borohydride mixed with water were studied using molecular dynamics simulations. Various concentrations of water and sodium borohydride were used in the model system. The values of dielectric permittivity and excess permittivity of solutions were calculated. Dielectric para-meters was compared according to different concentrations of water and sodium borohydride in solutions. These studies were carried out using the GROMACS software package. According to the studies, at  $x \sim 0.2$  molar concentrations of sodium borohydride, excess values of the dielectric constant were observed, and in a binary mixture of sodium borohydride – water, heteromolecular structures with the largest number of hydrogen bonds were formed.

**Keywords:** Solution, water-mixed sodium borohydrate, dielectric constant, hydrogen.

**Kirish.** Vodorod muqobil energiya manbai sifatida juda katta samaradorlikka ega. Hozirgi kunda zahirasi tiklanadigan energiya manbalaridan foydalanish asosiy muammo-lardan biridir. Vodoroddan turli maqsadda foydalanish uchun, avvalo uni saqlash, tashish, tarqatish va xavfsizlik masalasiga yechim topish lozimdir. Vodorodni saqlash tizimlariga qo'yiladigan talablar uni qo'llash xususiyati bilan belgilanadi. Vodorodni o'zini saqlashdan ko'ra, biror birikma bilan saqlash qulaydir. Bunda vodorodning birikmadagi hajmi va massa ulushi muhimdir. Katta ulushli va katta massali vodorodlarni saqlash uchun metall gidridlar yoki klatrat strukturalar ayni muddaodir[1,2]. Gidridlar orasida natriy borogidrat  $H_2$  ni yuqori miqdorda tutishi va barqarorligi tufayli alohida o'rin tutadi. Bu esa birikmaning katalitik gidrolizi nazorat qilinadigan sharoitlarda vodorod ishlab chiqarishni ta'minlaydi. Yana shuni ham aytish mumkinki, natriy borogidrat vodo-rodni qattiq holatda saqlash uchun eng yaxshi vositadir. 2012-yilda, ilk marota-ba vodorodni saqlash uchun, biror bir harorat va bosim sharoitini hosil qilmas-dan ham, natriy borogidrat vodorodni o'rtacha sharoitda saqlash, ajratish va qayta chiqaribolish uchun muvaffaqiyatli ishlatilgan [3].

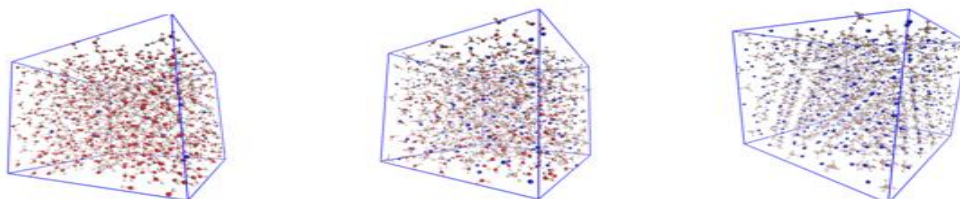
Natriy borogidrat, shuningdek, natriy tetragidridoboratva natriy tetrogidro- borat nomi bilan tanilgan. U noorganik birikma bo'lib, formulasi  $\text{NaBH}_4$ . Odatda natriy borogidrat oq kukun shaklidagi moddadir (1-rasm). Ushbu birikma 1940-yillarda H. I. Shlezinger tomonidan kashf etilgan[4].



1-rasm. Natriy borogidratning kukun holdidagi ko'rinishi

Biz molekulyar dinamika metodi bilan binar eritmalarining dielektrik singdiruvchanliklarini taqqoslaymiz, ortiqcha dielektrik konstantalarini hisoblaymiz va eng ko'p vodorod bog'iga ega strukturalarni aniqlaymiz. Olingan natijalar esa suyuqlikning qaysi konsentratsiyasida eng ko'p klatrat strukturalar hosil bo'lganini ko'rsatadi. Natijada esa vodorodni saqlash mumkin bo'lgan optimal suv va natriy borogidrat aralashmasini prognoz qilamiz.

**Metod.** Tadqiqotlar Ubuntu sistemasida GROMACS dasturida amalga oshirildi. Hisob-lashlar Berendsenning termostatik nazorat algoritmlari yordamida natriy borogidrat va suv molekullari bilan to'ldirilgan kubik qutida amalga oshirildi. Izlanishlar o'zgarmas bosim ( $P=10^7$  Pa) va haroratda (xona haroratida  $T=300$  K) olib borildi[5]. Harakat tenglamalari 1,0 fs vaqt qadamida Verlet algoritmi yordamida yechildi. Molekulalar orasidagi Kulon ta'sir kuchlari Evald usuli yordamida  $1 \cdot 10^{-6} \text{ kJ/mol}$  aniqlikda hisoblandi. Hisoblash jarayoni eritmaning 0.1÷1.0 konsentratsiyalarida takrorlandi. Suvning izotermik siqilish qobiliyati  $4.5 \cdot 10^6$  Pa qiymatda olindi. Aralashmadagi natriy borogidrat konsentratsiyasini oshirilishi bilan suv-suv, suv-eritma, eritma-eritma orasida vodorod bog'larining ketma ketligidagi o'zgarishlar sodir bo'ladi.



2-rasm. a) 10%  $\text{NaBH}_4$  va 90%  $\text{H}_2\text{O}$  bo'lgan box, b) 50%  $\text{NaBH}_4$  va 50%  $\text{H}_2\text{O}$  bo'lgan box, c) suv qo'shilmaganda  $\text{NaBH}_4$  ning boxdagi ko'rinishi

Molekulyar dinamika usuli yordamida natriy borogidrat va suv aralashmalari-ning butun konsentratsiya oralig'ida dielektrik singdiruvchanligi o'rganildi. Ularning  $\epsilon^E$  ortiqcha dielektrik doimiylari qiymati (1) formula orqali hisoblandi[6]:

$$\epsilon^E = (\epsilon_A - \epsilon_{A\infty}) - [(\epsilon_S - \epsilon_{S\infty})(1 - x) + (\epsilon_{\text{NaBH}_4} - \epsilon_{\text{NaBH}_4\infty})x]$$

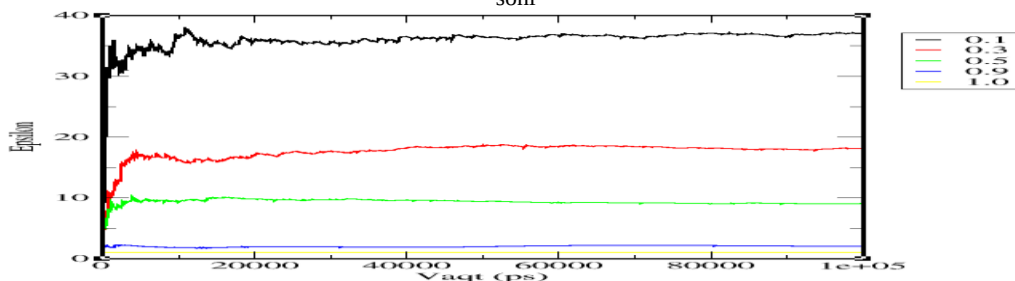
bu yerda  $\epsilon_A$  – aralashmaning dielektrik singdiruvchanligi,  $\epsilon_S$  – suvning dielektrik singdiruvchanligi,  $\epsilon_{\text{NaBH}_4}$  – natriy borogidratining dielektrik singdiruvchanligi  $x$ – natriy borogidratining konsentratsiyasi.

**Natija va muhokama.** Biz yuqorida qayd etilganidek suv va natriy borogidrat aralashmasining dielektrik singdiruvchanligi va shu bilan birga ortiqcha dielektrik singdiruvchanligini aniqladik(1-jadval).

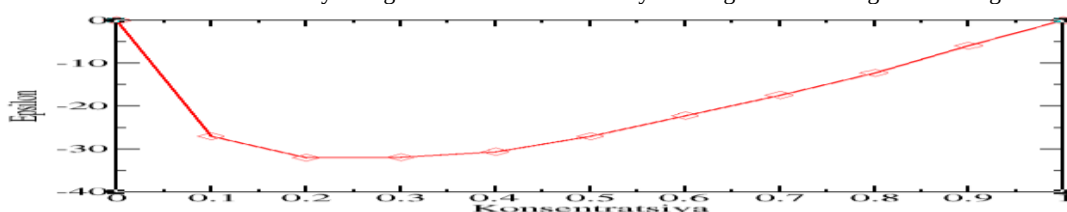
| Konsentratsiya | $X_{\text{NaBH}_4}$ | $Y_S$ | $\epsilon^E$ | $\epsilon^E$ |
|----------------|---------------------|-------|--------------|--------------|
| 0              | 0                   | 1000  | 71.09        | 0.09         |
| 0.1            | 100                 | 900   | 37.06        | -27.0244     |
| 0.2            | 200                 | 800   | 25.04        | -32.0388     |
| 0.3            | 300                 | 700   | 18.13        | -31.9432     |
| 0.4            | 400                 | 600   | 12.45        | -30.6176     |
| 0.5            | 500                 | 500   | 9.05         | -27.012      |
| 0.6            | 600                 | 400   | 6.854        | -22.2024     |
| 0.7            | 700                 | 300   | 4.65         | -17.4008     |
| 0.8            | 800                 | 200   | 2.786        | -12.2592     |
| 0.9            | 900                 | 100   | 2.135        | -5.9046      |
| 1              | 1000                | 0     | 1.034        | 0            |

1-jadval: Turli konsentratsiyalardagi suv va natriy borogidratni aralashmalarining dielektrik singdiruvchanlik  $\epsilon$  va ortiqcha dielektrik singdiruvchanligi  $\epsilon^E$  larning qiymatlari. Bu yerda  $X_{NaBH_4}$  – Natriy borogidrid va  $Y_s$  – suv molekulari soni

1-jadval: Turli konsentratsiyalardagi suv va natriy borogidratni aralashmalarining dielektrik singdiruvchanlik  $\epsilon$  va ortiqcha dielektrik singdiruvchanligi  $\epsilon^E$  larning qiymatlari. Bu yerda  $X_{NaBH_4}$  – Natriy borogidrid va  $Y_s$  – suv molekulari soni

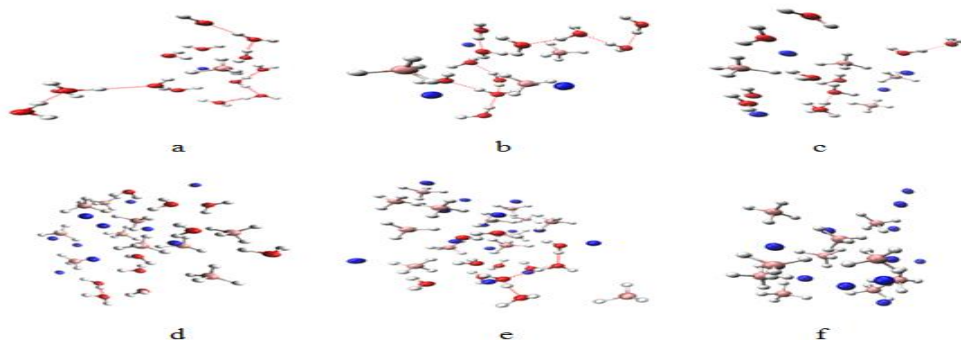


3-rasm. Suv va natriy borogidrat turli xil konsentratsiyalarining dielektrik singdiruvchanligi



4-rasm. Turli xil konsentratsiyali natriy borogidrat va suv eritmalarini ortiqcha dielektrik singdiruvchanligi

Eritmani uning tarkibidagi suv va natriy borogidratining turli xil konsentratsiya-lariga ko'ra dielektrik singdiruvchanliklari taqqoslandi (4-rasm). Taqqoslashlarga ko'ra, 0.1 mol konsentratsiyali eritmada dielektrik singdiruvchanlik  $\epsilon$  eng yuqori bo'lib, eritmada natriy borogidratning konsentratsiyasi ortishi bilan epsilon kamayib bordi. Ortiqcha dielektrik konstanta qiymatini aniqlash bo'yicha olib borilgan tadqiqotlarga ko'ra, izlangan natijalar natriy borogidratning  $x \sim 0.2$  mol konsentratsiyasida kuzatildi va unda natriy borogidrat–suv binar aralashmasida eng ko'p vodorod bog'iga ega bo'lgan geteromolekulyar strukturalar hosil bo'ldi.



5-rasm. Natriy borogidratning a) 10%; b) 20%; c) 40%; d) 50%; e) 60%; f) 100%

nisbatli konsentratsiyalarida natriy borogidrat – suv binar aralashmalarining vodorod bog'iga ega bo'lgan geteromolekulyar strukturalari tasviri

**Xulosa.** Suvga natriy borogidratni solinganda, uning dielektrik singdiruvchanligi kama-yar ekan. Bunda natriy borogidratining aralashmadagi konsentratsiyasi ortishi bilan, binar suyuqlikning dielektrik singdiruvchanligi kamayib bordi. Eritmalar 0.1 ÷ 1.0 konsentratsiyalar oralig'ida hosil qilindi. Bu oraliqda eng ko'p vodorod bog'iga ega bo'lgan strukturalar

esa  $x \sim 0.2$  mol konsentratsiyali natriy borogidrat–suv aralashmasida hosil bo'lishi aniqlandi. Demak, vodorodni saqlash uchun eng samarali borogidratli suv aralashmasi nazariy o'rganishlar yordamida prognoz qilindi. Kelajakda natijalarimizni tajriba qiladigan olimlar yo'l xaritasi sifatida foydalanishlari mumkin.

#### ADABIYOTLAR

1. Nilufar Axmedova, Jamoliddin Razzokov “Natriy borogidratlarning vodorodni saqlashdagi o'rni”. “Journal of new century innovations in all areas” 2022-yil.
2. Olga V. Netskina, Oksana V. Komova, Valentina I. Simagina, Anna G. Gntsler, Yekatrina D. Grayfer “Боргидрид натрия - источник чистого водорода для портативных топливных эле-ментов” Rossiya 2006-y.

3. Masimov, E. and H. Abbasov, Refractometry determination of the hydration number of ions in diluted aqueous solutions of magnesium sulfate. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2012. 86(3): p. 399-401.
4. Banfi, Luka; Narisano, Enrika; Riva, Renata; Stiasni, Nikola; Xieremann, Martin; Yamada, Tru; Tsubo, Tatsuyuki (2014), "Natriy Borohidrid", *Organik sintez uchun reaktivlar entsiklopediyasi*, John Wiley & Sons, 1-13 betlar, *doi:10.1002 / 047084289x.rs052.pub3*, ISBN 9780470842898
5. Grubmüller, H., et al., Generalized Verlet algorithm for efficient molecular dynamics simulations with long-range interactions. *Molecular Simulation*, 1991. 6(1-3): p. 121-142.
6. Ramana.C.V et al. Generalized and excess dielectric constants in non polar+ polar binary liquid mixtures of toluene with alcohols at 303, 313 and 323 K. *Thermochimica Acta*, 2013. 566: P. 130-136.