

2018

БЕШКЕНТ ЖАТАГЫНДАГЫ БЕНТОНИТТИН ФИЗИКА-
ХИМИЯЛЫК ЖАНА АДСОРБЦИОНДУК КАСИЕТТЕРИН ИЗИЛДӨӨ

Илияз Абдилла уулу



**КЫРГЫЗ-ТҮРК «МАНАС» УНИВЕРСИТЕТИ
ТАБИГЫЙ ИЛИМДЕР ИНСТИТУТУ
ХИМИЯЛЫК ТЕХНОЛОГИЯ БАГЫТЫ**

**БЕШКЕНТ ЖАТАГЫНДАГЫ БЕНТОНИТТИН
ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫК ЖАНА АДСОРБЦИОНДУК
КАСИЕТТЕРИН ИЗИЛДӨӨ**

**Даярдаган
Илияз Абдилла уулу**

**Жетекчиси
т.и.к., доцент Бакыт Боркочев**

Магистрдик диссертация

Декабрь 2018

БИШКЕК, КЫРГЫЗСТАН

**КЫРГЫЗ-ТҮРК “МАНАС” УНИВЕРСИТЕТИ
ТАБИГЫЙ ИЛИМДЕР ИНСТИТУТУ
ХИМИЯЛЫК ТЕХНОЛОГИЯ БАГЫТЫ**

**БЕШКЕНТ ЖАТАГЫНДАГЫ
БЕНТОНИТТИН ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫК
ЖАНА АДСОРБЦИОНДУК КАСИЕТТЕРИН
ИЗИЛДӨӨ**

**Даярдаган
Илияз АБДИЛЛА УУЛУ**

**Жетекчиси
т.и.к., доцент Бакыт БОРКОЕВ**

Магистрдик диссертация

Декабрь 2018

БИШКЕК/КЫРГЫЗСТАН

ПЛАГИАТ ЖАСАЛБАГАНДЫГЫ ТУУРАЛУУ БИЛДИРҮҮ

Мен бул эмгекте алынган бардык маалыматтарды академиялык жана этикалык эрежелерге ылайык колдондум. Тагыраак айтканда, бул эмгекте колдонулган, бирок мага тиешелүү болбогон маалыматтардын бардыгын тиркемеде так көрсөттүм жана башка булактардан плагиат жасалбагандыгына ынандырып кетким келет.

Илияз АБДИЛЛА УУЛУ

Колу:

НУСКАМАГА ТУУРА КЕЛҮҮСҮ

«Бешкент жатагындагы бентониттин физика-химиялык жана адсорбциондук касиеттерин изилдөө» атындагы магистратуралык квалификациялык бүтүрүү иши, Кыргыз-Түрк “Манас” Университети Жогорку Билим Берүү жана Квалификациялык Бүтүрүү Иштерин Даярдоо жана Жазуу Нускамасына ылайык жасалды.

Илияз АБДИЛЛА УУЛУ

Колу:

т.и.к., доцент Бакыт БОРКОЕВ

Колу:

Химиялык Технология Багытынын Башчысы

Проф. Селахаттин ГҮЛТЕКИН

Колу:

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmada tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçlar tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

İliaz ABDİLLA UULU

İmza:

YÖNERGEYE UYGUNLUK

«Beşkent Cevherindeki Bentonitlerin Fizikokimyasal ve Adsorpsiyon Özelliklerinin Araştırılması» adlı Yüksek Lisans tezi, Kırgızistan-Türkiye Manas Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Tez Hazırlama ve Yazma Yönergesi'ne uygun olarak hazırlanmıştır.

İliaz ABDİLLA UULU

İmza:

Doç. Dr. Bakıt BORKOEV

İmza:

Kimya Mühendisliği ABD Başkanı

Prof. Selahattin GÜLTEKİN

İmza:

КАБЫЛ АЛУУ ЖАНА ЧЕЧИМ

т.и.к., доцент Бакыт БОРКОЕВ жетекчилигинде Илияз АБДИЛЛА УУЛУ тарабынан даярдалган «Бешкент жатагындагы бентониттин физика-химиялык жана адсорбциондук касиеттерин изилдөө» темасындагы магистрдик иш комиссия тарабынан Кыргыз-Түрк “Манас” университетинин Табигый илимдер институтунун Химиялык Технология багытында магистрдик иш болуп кабыл алынды.

..... / / 2018

Комиссия:

Илимий жетекчи: т.и.к., доцент Бакыт БОРКОЕВ

Төрөгасы: Проф. Др.

Мүчө: Проф. Др.

Мүчө: Проф. Др.

Мүчө: Проф. Др.

ЧЕЧИМ:

Бул бүтүрүү иши, Институт Башкаруу Кеңешинин датасындагы жана номерлүү чечими менен кабыл алынды.

..... / / 2018

Доц. Др. Дагыстан ШИМШЕК

Институт Мүдүрү

KABUL VE ONAY

Doç. Dr. Bakıt BORKOEV danışmanlığında İliaz ABDİLLA UULU tarafından hazırlanan «Beşkent Cevherindeki Bentonitlerin Fizikokimyasal ve Adsorpsiyon Özelliklerinin Araştırılması» adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Kırgızistan-Türkiye Manas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Mühendisliği Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

..... / / 2018

JÜRİ:

Danışman: Doç. Dr. Bakıt BORKOEV

Komisyon başkanı: Prof. Dr.

Üye: Prof. Dr.

Üye: Prof. Dr.

Üye: Prof. Dr.

ONAY:

Bu tezin kabülü Enstitü Yönetim Kurulunun tarih ve sayılı kararı ile onaylanmıştır.

..... / / 2018

Doç. Dr. Dağıstan ŞİMŞEK

Enstitü Müdürü

АЛГАЧ СӨЗ

Билим алууда салымы чоң, магистрдик ишти даярдоодо мага жардамын жана ой пикирлерин аябаган илимий жетекчим техникалык илимдеринин кандидаты, доцент Бакыт Боркоев агайга, химия илимдеринин кандидаты Калипа Салиева эжейге, бөлүм башчы Селахаттин Гүлтекин агайга, Бахороддин Душабаев агайга, группалаштарым Талантбек кызы Жаркынга, Калбеков Алимжанга жана магистрдик окуу процессинде окуткан Табигый илимдер институтунун жалпы мугалимдер жамаатына жана кызматкерлерине терең ыраазычылыгымды билдирем.

Илияз Абдилла уулу
Бишкек, Декабрь, 2018

**БЕШКЕНТ ЖАТАГЫНДАГЫ БЕНТОНИТТИН ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫК
ЖАНА АДСОРБЦИОНДУК КАСИЕТТЕРИН ИЗИЛДӨӨ**

ИЛИЯЗ АБДИЛЛА УУЛУ

КЫРГЫЗ-ТҮРК «МАНАС» УНИВЕРСИТЕТИ

ТАБИГЫЙ ИЛИМДЕР ИНСТИТУТУ

МАГИСТРДИК ДИССЕРТАЦИЯ

ДЕКАБРЬ 2018

ИЛИМИЙ ЖЕТЕКЧИ: т.и.к., доцент БАКЫТ БОРКОЕВ

КЫСКАЧА МАЗМУНУ

Бешкент жатагы Баткен облусунун Лейлек районунда Ленинабад шаарынын (Тажик Республикасы) темир жол станциясынын түштүк тарабынан 38 км, ал эми Мергун айылынын түндүк тарабынан 8 км алыстыкта, 1350-1450м абсолюттук бийиктикте) жайгашкан. Бешкент жатагынын бентонит чопосу бүгүнкү күнгө чейин негизинен жер алдындагы кең байлыктарды жана алардын запасын изилдөө үчүн бурголоочу жабдыктардын эритмесин жасоодо колдонулуп келген. Ал эми адсорбент катары колдонулган эмес, ошондуктан Бешкент жатагынын чопосунун физика-химиялык, адсорбциялык, технологиялык жана башка касиеттерин изилдөө жана алардын негизинде жаңы материалдарды алуу илимий жана практикалык жактан кызыкчылык туудурат.

Магистрдик жумуштун максаты Бешкент жатагынын чопосунун физика-химиялык жана сорбенттик касиеттерин аныктоо, адсорбция методунун иштөө принциби менен таанышуу жана үйрөнүү, бентонит чопосун изилдөөдөгү алынган жыйынтыктарды кеңири тараган адсорбенттер менен салыштыруу.

Бешкент жатагынын бентонит чопосунун физика-химиялык касиеттери (катион алмашуу жөндөмдүүлүгү, гранулометриялык, химиялык курамдары ж.б.) жана кремний оксидинин алюминий оксидине болгон катышы 5:1 туура келери аныкталды. Аткарылган изилдөөлөрдүн жыйынтыгында Бешкент жатагынын чопосу монтмориллонит чополордун өкүлү болуп эсептелери далилденди. Ошондой эле метилен көктүн Бешкент жатагынын бентонит чопосунун адсорбциялык тең салмактуулугуна температуранын таасири изилденди. Тең салмактуу адсорбциянын жыйынтыктары эки белгилүү

изотермалардын жардамы менен алынды жана алар Ленгмюр жана Фрейндлих изотермалары экендиги көрсөтүлдү. Эң жакын изотерманы аныктоо үчүн сызыктуу эмес ыкмасы колдонулду. Бул учурда Фрейндлих изотермасы Ленгмюр изотермасына караганда эң жакын изотерма болуп чыкты. Адсорбциялык касиеттердин жыйынтыгы боюнча Бешкент жатагынын бентонит чопосу метилен көк боёгун адсорбциялоого жогорку жөндөмдүүлүгүн көрсөттү.

Иштин жыйынтыктары боюнча “Бешкент жатагынын бентонит чопосунун адсорбциялык жөндөмдүүлүгү” аттуу макала “Наука, новые технологии и инновации Кыргызстана” илимий журналынын жетинчи чыгарылышында жарыяланды.

Ачкыч сөздөр: чопо, адсорбция, температура, бентонит, монтмориллонит, метилен көк.

**BEŞKENT CEVHERİNDEKİ BENTONİTLERİN FİZİKOKİMYASAL VE
ADSORPSİYON ÖZELLİKLERİNİN ARAŞTIRILMASI**

İLYAZ ABDİLLA UULU

KIRGIZİSTAN-TÜRKİYE MANAS ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS, ARALIK 2018

DANIŞMAN: DOÇ. DR. BAKIT BORKOYEV

GENİŞ ÖZET

Beshkent cevheri Batken bölgesinin Lyailyak ilçesinde, Leninabad tren istasyonunun 38 km güneyinde (Tacikistan) ve 8 km kuzeyde yer almaktadır. Margun, 1350-1450 m. Beshkent yatağından gelen bentonit kili, bugün minerallerin ve rezervlerinin incelenmesi için sondaj sıvılarının hazırlanmasında hala kullanılmaktadır. Bir adsorban olarak kullanılmadı; Bu nedenle, Beshkent cevherinin bentonit killerinin fizikokimyasal, adsorpsiyon, teknolojik ve diğer özelliklerinin araştırılması ve bunların temelinde yeni materyallerin üretimi, bilimsel ve pratik ilgidir.

Fizikokimyasal özellikler (katyon değişim kapasitesi, partikül büyüklüğü dağılımı, kimyasal kompozisyon, vb.) belirlendi ve silikon oksitin alüminyum oksite oranının 5: 1 karşılık geldiği tespit edildi. Çalışma sonucunda, Beshkent cevherindeki kilin bir montmorillonit kili temsilcisi olduğu kanıtlanmıştır. Sıcaklığın bentonit içindeki metilen mavinin denge adsorpsiyonu üzerindeki etkisi de araştırıldı. Denge adsorpsiyon verileri, Langmuir ve Freundlich gibi yaygın kullanılan iki izoterm kullanılarak analiz edildi. İzotermelerin en iyi uyumunu karşılaştırmak için, lineer olmayan yöntem kullanıldı ve bu da Freundlich izoterminin Langmuir izoterminden daha uygun olduğunu gösterdi. Adsorpsiyon özelliklerinin sonuçları, Beshkent depozitinin bentonitinin, katyonik boya metilen mavisini adsorbe etme yeteneği ile karakterize olduğunu göstermiştir.

Araştırma konusu üzerine Bişkek, “Bilim, yeni teknolojiler ve Kırgızistan yenilikleri” dergisinin yedinci sayısında “Beshkent cevherinin bentonit kilinin adsorpsiyon özelliği” başlığı altında bir bilimsel makale yayınlandı.

Anahtar kelimeler: kil, adsorpsiyon, sıcaklık, bentonit, montmorillonit, metilen mavisi.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И АДсорбЦИОННЫХ СВОЙСТВ БЕНТОНИТА БЕШКЕНТСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

ИЛИЯЗ АБДИЛЛА УУЛУ

КЫРГЫЗСКО-ТУРЕЦКИЙ УНИВЕРСИТЕТ "МАНАС"

ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

ДЕКАБРЬ 2018

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ: к.т.н., доц. БАКЫТ БОРКОЕВ

АННОТАЦИЯ

Месторождение Бешкент расположено в Ляйлякском районе Баткенской области, в 38 км к югу от железнодорожной станции города Ленинабад (Таджикистан) и в 8 км к северу от с. Маргун, на абсолютной высоте 1350-1450 м. Бентонитовая глина месторождения Бешкент до сегодняшнего дня используется в приготовлении буровых растворов для исследования полезных ископаемых и их запасов. В качестве адсорбента не используется, в связи с этим изучение физико-химических, адсорбционных, технологических и других свойств бентонитовых глин месторождения Бешкент и получение на их основе новых материалов представляет научный и практический интерес.

Были определены физико-химические свойства (катионообменная емкость, гранулометрический, химический составы и др.) и что соотношение оксида кремния к оксиду алюминия соответствует 5:1 бентонита месторождения Бешкент. В результате проведенного исследования было доказано, что глина месторождения Бешкент является представителем монтмориллонитовых глин. Также было исследовано влияние температуры на равновесную адсорбцию метилена синего в бентоните. Данные равновесной адсорбции были проанализированы с использованием двух широко применяемых изотерм, таких как Ленгмюр и Фрейндлих. Для сравнения наилучшего соответствия изотерм использовался нелинейный метод в ходе которого выяснилось, что изотерма Фрейндлиха подходит больше, чем изотерма Ленгмюра. Результаты адсорбционных свойств показали, что бентонит месторождения Бешкент характеризуется высокой способностью к адсорбции катионного красителя метиленового синего.

По теме исследований опубликована одна научная статья под названием: «Адсорбционное свойство бентонита месторождения Бешкент» в седьмом номере журнала «Наука, новые технологии и инновации Кыргызстана», г. Бишкек.

Ключевые слова: глина, адсорбция, температура, бентонит, монтмориillonит, метилен синий.

**INVESTIGATION OF THE PHYSICOCHEMICAL AND ADSORPTION
PROPERTIES BENTONITES IN THE BESHKENT DEPOSITS**

ILIIAZ ABDILLA UULU

KYRGYZSTAN-TURKEY MANAS UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE

M.SC. THESIS

DECEMBER 2018

SUPERVISOR: ASSOCIATE DR. BAKYT BORKOYEV

ABSTRACT

The Beshkent deposit is located in the Lyailyak district of the Batken region, 38 km south of the Leninabad railway station (Tajikistan) and 8 km north of p. Margun, at an absolute height of 1350-1450 m. Bentonite clay from the Beshkent deposit is still used today in the preparation of drilling fluids for the study of minerals and their reserves. It is not used as an adsorbent; therefore, the study of the physicochemical, adsorption, technological, and other properties of the bentonite clays of the Beshkent deposit and the production of new materials on their basis is of scientific and practical interest.

The physicochemical properties (cation-exchange capacity, particle size distribution, chemical composition, etc.) were determined and that the ratio of silicon oxide to aluminum oxide corresponds to 5: 1 bentonite from the Beshkent deposit. As a result of the study, it was proved that the clay from the Beshkent deposit is a representative of montmorillonite clays. The effect of temperature on the equilibrium adsorption of methylene blue onto bentonite was also investigated. The equilibrium adsorption data was analyzed using two widely used isotherms, such as Langmuir and Freundlich. To compare the best fit of the isotherms, the nonlinear method was used in the course, which revealed that the Freundlich isotherm is more suitable than the Langmuir isotherm. The results of the adsorption properties showed that the bentonite of the Beshkent deposit is characterized by a high ability to adsorb the cationic dye methylene blue.

On the topic of research, one scientific article was published under the title: “Adsorption property of bentonite from the Beshkent deposit” in the seventh issue of the journal “Science, New technologies and Innovations in Kyrgyzstan” Bishkek.

Keywords: clay, adsorption, temperature, bentonite, montmorillonite, methylene blue.

МАЗМУНУ

БЕШКЕНТ ЖАТАГЫНДАГЫ БЕНТОНИТТИН ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫК ЖАНА АДСОРБЦИОНДУК КАСИЕТТЕРИН ИЗИЛДӨӨ

ПЛАГИАТ ЖАСАЛБАГАНДЫГЫ ТУУРАЛУУ БИЛДИРҮҮ.....	ii
НУСКАМАГА ТУУРА КЕЛҮҮСҮ.....	ii
BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK	iii
YÖNERGEYE UYGUNLUK.....	iii
КАБЫЛ АЛУУ ЖАНА ЧЕЧИМ.....	iv
KABUL VE ONAY.....	v
АЛГАЧ СӨЗ.....	vi
КЫСКАЧА МАЗМУНУ.....	vii
GENİŞ ÖZET	ix
АННОТАЦИЯ.....	x
ABSTRACT.....	xii
МАЗМУНУ.....	xiv
СИМВОЛДОР ЖАНА КЫСКАРТУУЛАР.....	xvi
ЖАДЫБАЛДАРДЫН ТИЗМЕСИ.....	xvii
СҮРӨТТӨРДҮН ТИЗМЕСИ.....	xviii

КИРИШҮҮ.....	1
--------------	---

2. БӨЛҮМ.

АДАБИЯТ-МААЛЫМАТТЫК ТАЛДОО

2.1.Чопо минералдары.....	3
2.2.Чопо минералдарынын классификациясы.....	4
2.3.Чопо минералдарынын түзүлүшү.....	6
2.4.Бентонит.....	11
2.4.1.Бентониттин минералогиясы.....	12
2.4.2.Бентониттин химиялык жана структура-механикалык касиеттери.....	12
2.5.Монтмориллонит чопосунун касиеттери жана структураларынын	

негиздери.....	14
2.5.1. HyperChem программасы.....	16

3. БӨЛҮМ.

ИЗИЛДӨӨ ОБЪЕКТИСИ ЖАНА ЫКМАЛАРЫ

3.1.Изилдөө объектиси.....	22
3.2.Изилдөө ыкмалары.....	22
3.2.1.Бентониттин физика-химиялык касиеттерин изилдөө методдору.....	22
3.2.2.Бентониттин адсорбенттик касиетин изилдөө методу.....	26
3.2.3.Монтмориллонит чопосунун касиеттери жана структурасын эсептөө методикасы.....	31
3.2.4.HyperChem программасында эсептөөлөрдү жүргүзүү.....	42
3.2.5.Кванттык-химиялык методу менен алынган алюминий оксидинин жана кремний оксидинин оптимизацияланган геометриялык түзүлүштөрү.....	43
3.2.6.Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу атом аралык өз ара аракеттешүүлөрүнүн кванттык-химиялык анализдери.....	45
3.2.7.Кванттык-химиялык методу менен алынган монтмориллонит чопосунун оптимизацияланган геометриялык түзүлүшү.....	45

4. БӨЛҮМ.

АЛЫНГАН ЖЫЙЫНТЫКТАРДЫ ТАЛКУУЛОО

4. Жыйынтыктар.....	50
---------------------	----

5. БӨЛҮМ.

КОРУТУНДУЛАР

5. Коротундулар.....	52
АДАБИЯТТАР.....	53

ӨМҮР БАЯН

СИМВОЛДОР ЖАНА КЫСКАРТУУЛАР

Кыскартуулар	Мааниси
нм	нанометр
μм	микрометр
мм	миллиметр
см	сантиметр
М	метр
км	километр
г/см ³	грамм/сантиметр кубта
см ³	сантиметр кубта
Г	грамм
N	нормалдуу концентрация
Мл	миллилитр
л	литр
С	секунда
мг/л	миллиграмм/литр
мг/г	миллиграмм/грамм
л/мг	литр/миллиграмм
°С	градус Цельсий
айл/мин	айлануу/минутада
КМЖ	күйгүзүүдөгү масса жоготуу
КАЖ	катион алмашуу жөндөмдүүлүгү

ЖАДЫБАЛДАРДЫН ТИЗМЕСИ

Жадыбал 2.2.1.Чопо минералдарынын классификациясы.....	4
Жадыбал 2.5.1.1.HyperChem программасындагы кээ бир түшүнүктөр.....	17
Жадыбал 3.2.1.1.Изилденүүчү чопонун катион алмашуу жөндөмдүүлүгү.....	23
Жадыбал 3.2.1.2.Изилденүүчү чопонун нымдуулугу.....	24
Жадыбал 3.2.1.3.Изилденүүчү чопонун күйгүзүүдөгү масса жоготуусу.....	24
Жадыбал 3.2.1.4.Изилденүүчү чопонун химиялык курамы.....	25
Жадыбал 3.2.2.2. Метилен көк эритмесинин эсептелинген баланстагы концентрациялары.....	28
Жадыбал 3.2.2.7. Алынган жыйынтыктар.....	30
Жадыбал 3.2.5.1. AlO_4 геометриялык параметрлери.....	43
Жадыбал 3.2.5.2. SiO_4 геометриялык параметрлери.....	43
Жадыбал 3.2.5.3. AlO_6 геометриялык параметрлери.....	44
Жадыбал 3.2.6.1.Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу геометриялык параметрлери.....	45
Жадыбал 3.2.7.3.Монтмориллониттин байланыш узундуктары жана байланыш тартиптери.....	47
Жадыбал 3.2.7.4.Монтмориллониттеги атомдордун заряддары.....	48
Жадыбал 3.2.7.5.Монтмориллониттин атомдор арасы бурчтары.....	49

СҮРӨТТӨРДҮН ТИЗМЕСИ

Сүрөт 2.3.1. Каолинит катмарынын структурасынын схематикалык көрүнүшү Грюнер боюнча.....	6
Сүрөт 2.3.2. Каолинит жана галлуазиттин структураларынын схематикалык көрүнүшү Бейтс боюнча	7
Сүрөт 2.3.3. Монтмориллониттин структурасынын схематикалык көрүнүшү Гофманн, Энделл, Вилк, Маршалл жана Хендрикс боюнча.....	9
Сүрөт 3.2.1.5. Бешкент чопосунун гранулометриялык курамы.....	26
Сүрөт 3.2.2.1. Калибрлөө ийриси.....	28
Сүрөт 3.2.2.3. Түрдүү температурадагы тажрыйбалык адсорбция изотермасы.....	29
Сүрөт 3.2.2.4. Түрдүү температурадагы Ленгмюр адсорбция изотермасы.....	29
Сүрөт 3.2.2.5. Түрдүү температурадагы Фрейндлих адсорбция изотермасы.....	30
Сүрөт 3.2.2.6. 303К деги Фрейндлих, Ленгмюр жана эксперименталдык адсорбция изотермалары.....	30
Сүрөт 3.2.3.1. Метод тандоо – Balls.....	34
Сүрөт 3.2.3.2. Жакындатылган молекуланын көрүнүшү.....	35
Сүрөт 3.2.3.3. Молекуланын мейкиндикте толукталган сүрөттөлүшү.....	35
Сүрөт 3.2.3.4. Молекуланын көрүнүшүнүн сүрөттөлүшү.....	36
Сүрөт 3.2.3.5. Элементтердин таблицасы.....	37
Сүрөт 3.2.3.6. Азот элементи жөнүндө маалымат.....	37
Сүрөт 3.2.3.7. Атомдордун жайгаштырылышы.....	38
Сүрөт 3.2.3.8. Атомдордун байланышуусу.....	39
Сүрөт 3.2.3.9. Атомдордун бири-бири менен биригиши.....	40
Сүрөт 3.2.7.1. Монтмориллониттин оптимизацияланган геометриялык түзүлүшү (HyperChem программасында PM3 методу).....	46
Сүрөт 3.2.7.2. Монтмориллониттин оптимизацияланган геометриялык түстүү түзүлүшү (HyperChem программасында PM3 методу).....	46

КИРИШҮҮ

Чопо – бул тоо породасынын эң кеңири таралган түрү болуп эсептелинет. Ал жер кыртышынын жалпы көлөмүнүн 11% түзөт. Чополор имараттын фундаментин, ар түрдүү инженердик курулуштарды курууда колдонулат. Ошондой эле алар чийки зат катары керамика, кирпич, цемент өдүрүшүндө жана толтургуч катары резина, кагаз, бургулоо суюктуктарды жасоодо колдонулуп келет. Чополор жогорку адсорбциондук жөндөмдүүлүккө ээ болгондуктан май, боёк, шарап, кездемелерди тазалоо үчүн колдонулат.

Бешкент жатагы Лейлек районунан 38 км алыстыкта, 1350-1450 м абсолюттук бийиктикте жайгашкан. Тажикистандын Каракум экспедициясы тарабынан 1968-жылы изилденип баштап, 1973-1974жж изилденип бүткөн (Федотов В.А., 1969-ж., Водров А.П., 1975-ж.) [1]. Бешкент жатагынын чопосу бүгүнкү күнгө чейин негизинен жер алдындагы кең байлыктарды жана алардын запасын изилдөө үчүн бурголоочу жабдыктардын эритмесин жасоодо колдонулуп келген. Ал эми адсорбент катары колдонулган эмес. Ушуга байланыштуу Бешкент жатагынын чопосунун физика-химиялык, структуралык, технологиялык жана башка касиеттерин изилдөө жана алардын негизинде жаңы материалдарды алуу илимий жана практикалык жактан кызыкчылык туудурат.

Кванттык-химиялык эсептөөлөрдүн жардамы менен системанын оптималдуу геометриясын, негизги абал энергияларын, термодинамикалык параметрлерин (бирок жакындатуулардын бири боюнча атомдордун ядролору жылышсыз абалда деген жыйынтыкка келет, демек мында температура да абсолюттук нөлгө барабар дегенди түшүндүрөт), электр талааларынын параметрлери жана электрондук тыгыздыктын бөлүнүшү. Эсептөөлөрдүн жана эксперименталдык методдордун чогуу колдонулушу жаңы маалыматтарды алууну камсыз кылат жана эксперименттин натыйжаларын текшерип түшүндүрүүгө мүмкүнчүлүк берет.

Диссертациялык иштин максаты: Бешкент жатагынын чопосунун физика-химиялык жана адсорбенттик касиеттерин аныктоо.

Максатка жетүү үчүн төмөнкү маселелер коюлду:

- Бешкент жатагынын бентонит чополорунун физика-химиялык касиеттерин аныктоо.

-Бентонит чопосунун адсорбенттик касиетин аныктоо.

-Монтмориллониттин оптималдаштырылган түзүлүшүнүн геометриялык параметрлерин кванттык-химиялык методу менен аныктоо.

2. БӨЛҮМ. АДАБИЯТ-МААЛЫМАТТЫК ТАЛДОО

2.1. Чопо минералдары

Чопо – бул майда бөлүкчөлүү минералдардан турган жана топурактын табигый келип чыккан бөлүгү болуп саналат. Чопо бөлүкчөсүнүн көлөмү 2 микрондон кичине болот. Ысытканда пластик, бышырганда катуу, курамында суу молекулалары кармалган алюминий силикат минералдарынан турган система катары аныкталат.

Бүгүнкү күндө минералдарды эки топко бөлүшөт: ири бөлүкчө 0,01 ммден чоң жана майда бөлүкчө 0,01 ммден кичине. Ири бөлүкчөлөр, желдетүү процессинде сакталып калган, массивдүү-кристаллдык жана метаморфтук породаалардан чөкмөгө түшкөн калдык (детриттик) минералдарды камтыйт. Аларга кварц, талаа шпаты, слюда, пироксендер, циркон жана башкалар кирет. Акыркы айтылган заттар жогорку температура жана басым алдында пайда болуп биринчилик материалдарга кирет жана чополорго мүнөздүү эмес. Майда бөлүкчөлөр, көбүнчө шамалдатуу процессинде төмөн температура жана басым алдында чопо пайда кылган экинчилик минералдарды камтыйт. Бул — монтмориллонит, нонтронит, гидрослюда, каолинит (медициналык ак чопонун негизги минералы), галлуазит ж.б. Алар чопо жана чопо породааларынын спецификалык жана мүнөздүү минералдары болуп эсептелет. Бул минералдардын көбү анык көрүнгөн коллоиддик - химикалык (пептизация, коагуляция, ион алмашуу ж.б.) касиеттерге жана ошого жараша ар түрдүү аталыштарга ээ болушат [2, 3]. Алардын ичинен эң эле ылайык келген аталышы – дисперстик минералдар. Бул термин минералдардын коллоиддик, коллоиддикке чейинки жана кесек дисперстүү фракцияларын камтыган системанын абалын толук көрсөтөт.

Чопо минералдарынын касиеттерин биринчиден алардын химиялык курамы, кристаллдык торчонун түзүлүшү, жогорку дисперстүү абалы, ион алмашууга жөндөмдүүлүгү жана ар кандай полярдуу дисперс чөйрөсүнүн адсорбцияланышы аркылуу аныкташат.

2.2. Чопо минералдарынын классификациясы

Чополордун минералогиялык касиеттери боюнча классификациясы кристаллдык структурасына жараша болот. Жалпы торчолуу жана чынжыр түзүлүш боюнча эки топко бөлүнөт. Бул классификация жадыбал 1.2.1.де келтирилген.

Жадыбал 2.2.1. Чопо минералдарынын классификациясы.

Түзүлүш	Катмар	Группа	Түрү
Торчолуу түзүлүшүндө болгондор	1:1 катмардуулар	Каолинит группасы	Каолинит
		Бирдей өлчөмдөгүлөр	Сталагмит
		Бир багытта узун жайгашкан	Галлуазит
	2:1 катмардуулар	Смектит группасы	Монтмориллонит
		Иллит группасы	Иллит
		Вермикулит группасы	Вермикулит
	2:1:1 катмардуулар	Хлорит группасы	Хлорит
Чынжыр түзүлүшүндө болгондор	Булутуу катмар	Сепиолит группасы	Сепиолит
		Палыгорскит группасы	Палыгорскит, аттапульгит

Каолинит тобундагы чополор

Каолинит, сталагмит жана галлуазит жалпы формуласы $Al_4[Si_4O_{10}](OH)_8$ болот. Табиятта таза каолинит кендери болбойт. Көбүнчө темир кычкылын, кремний кычкылын жана башка заттарды камтыйт. Керамикада толтургуч катары боёк, каучук жана пластиктерди чыгарууда жана көптөгөн сфераларда колдонулат [4].

Смектит тобундагы чополор

Структурасында магний, кальций, темир, натрий сыяктуу элементтерди камтышат жана жалпы формуласы $(Na/Ca)_{0.33}(Al/Mg)_2Si_4O_{10}(OH)_2 \cdot (H_2O)_2$. Монтмориллониттин байытууга чейинки көрүнүшүнө бентонит деген соода аталышы берилген [5].

Хлорит тобундагы чополор

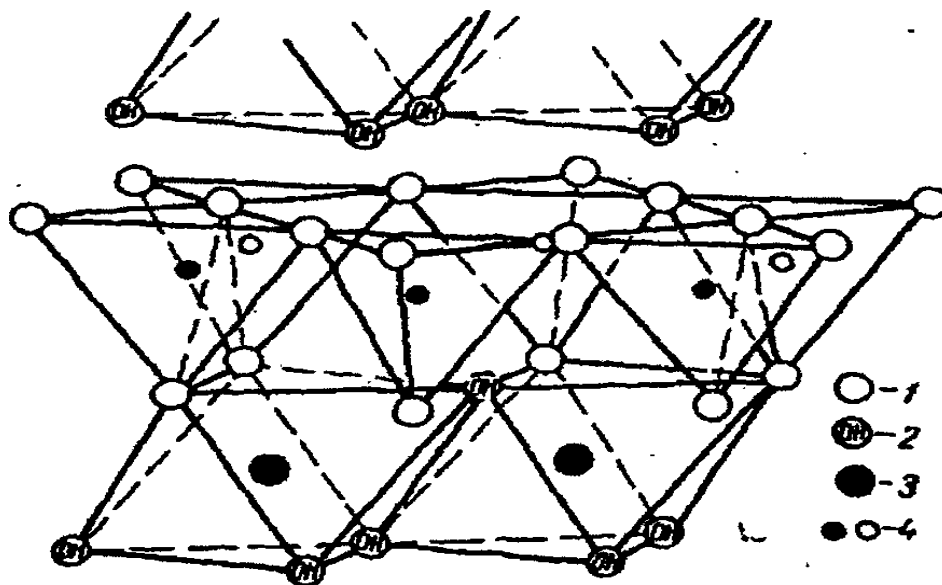
Хлорит группадагы чополор майда бүртүкчөлүү жана жашыл түсүндө болот. Бул чополордо көп санда магний, темир (II), темир (III) жана кремний кездешет. Негизинен хлорит тобунун минералдары филосиликаттардын ичинде бирдей группа болуп, бирок ал топтун бөлүгү болуп эсептелинбейт. Жалпы формуласы $(Mg,Fe)_3(Si,Al)_4O_{10}(OH)_2 \cdot (Mg,Fe)_3(OH)_6$. Бул группа эч бир өнөр жайда колдонулбайт [6].

Иллит тобундагы чополор

Иллит тобундагы чополор башкалардан айырмаланып калий элементин камтыйт. Бул топту слюда тобу деп да атасак болот. Жалпы формуласы $(K_{0.75}(H_3O)_{0.25})Al_2(Si_3Al)O_{10}((H_2O)_{0.75}(OH)_{0.25})_2$ болот. Бул топтун структурасы силикат катмардуу монтмориллониттин тобуна окшош. Толтургуч катары жана бургулоо эритмесин жасоодо колдонулат [7].

2.3. Чопо минералдарынын түзүлүшү

Чопо минералдарынын кристаллдык торчолорунун структураларын рентгенографикалык изилдөөлөрүнүн негизинде Маршалл [8] эки негизги типтеги торчого таянып классифицирлеген: 1 : 1 (каолинит) жана 2 : 1 (монтмориллонит). Анын пикири боюнча, бул типтердин структуралары башка чопо минералдарына да таркалышы мүмкүн. 1 : 1 типтеги минерал глиноземдун бир бирдигинин жана кремнеземдун бир бирдигинин бирикмелеринен турат. Мындай структуранын көрүнүшүн Маршалл оюн картасына салыштырат жана анда ар бир экинчи карта глиноземдун катмарлары, ал эми ортодогу карталар кремнеземдун катмарлары.



Сүрөт 2.3.1. Каолинит катмарынын структурасынын схематикалык көрүнүшү Грюнер боюнча [9].

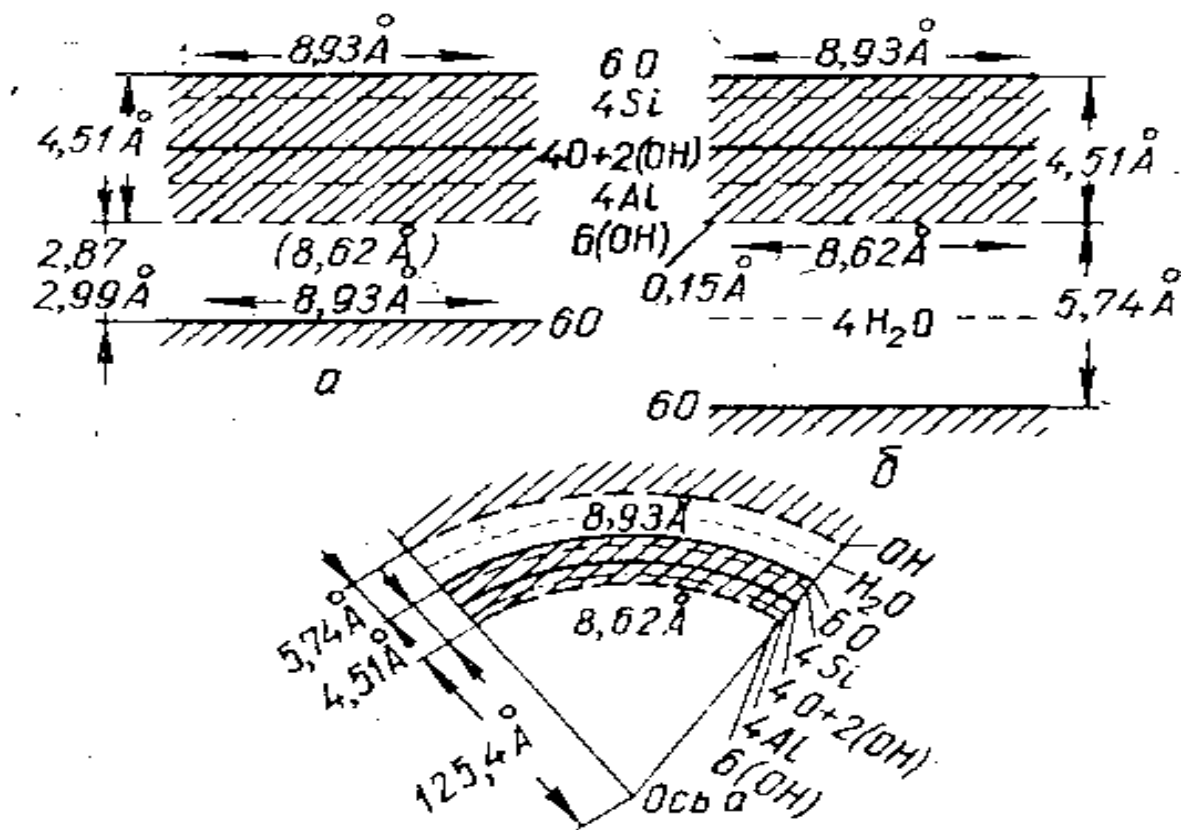
Бул жерде, 1 — кычкылтектин атомдору; 2 — гидроксилдер; 3— алюминийдин атомдору; 4— кремнийдин атомдору.

Глиноземдун жана кремнеземдун торчолору тетраэдрдин чокулары октаэдрдин чокусуна байланышып бир катмарга бириккен. Сүрөт 2.3.1.де көрсөтүлгөндөй OH – топтору тетраэдрдик катмарда кычкылтектин атомдорунун псевдогексагоналдуу торчосунун тешикчесинин алдында жайгашкан. Мындай структуралык формула $(\text{OH})_8 \cdot \text{Si}_4 \cdot \text{Al}_4 \cdot \text{O}_{10}$ [10] көрүнүшкө ээ жана анын теоретикалык курамы: 46, 54% SiO_2 ; 39,50% Al_2O_3 ; 13,96% H_2O .

Диккит [11] жана накриттин [12] структуралары кандайдыр бир деңгээлде каолиниттин структурасына окшош болот жана чопо минералдарынын тобуна

киришет (бирок чоподо өтө аз кездешет). Каолиниттей эле, алар бир алюмокычкылтектүү менен бир кремнекычкылтектүү катмардан турат жана катмарлардын жайгашуу мүнөзүнөн гана айрымаланып турат.

Каолинит типиндеги структурага галлуазит минералы ээ болуп саналат. Галлуазит минералдарында каолинит катмарлары гидратациянын жыйынтагында ирээтсиз аралашкан (сүрөт 2.3.2.).



Сүрөт 2.3.2. Каолинит жана галлуазиттин структураларынын схематикалык көрүнүшү Бейтс боюнча:

Бул жерде, *a* — каолинитте катмарлардын жайгашуусу; *б* — галлуазитте катмарлардын жайгашуусу Хендрикс боюнча; *в* — галлуазитте катмарлардын жайгашуусу.

Галлуазит гидратирленген түрүндө $(OH)_8 \cdot Si_4 \cdot Al_4O_{10} \cdot 4H_2O$ курамы менен мүнөздөлөт жана периоддун узундугунун мааниси O тегиздигинде 8,93 Å барабар, ал эми OH тегиздигинде — 8,62 Å (сүрөт 2.3.2.). Акыркы көрүнүш галлуазиттин ийилген түтүкчө түрүндөгү структуранын пайда болушун

жөндөйт[8]. Дегидратация процессинде суунун эки молекуласын жоготуу менен галлуазиттин трубкасы бузулат жана структура каолинит тобунун негизги структурасына жакындайт. Монтмориллонит тобунун минералдарына экинчи типтеги торчо мүнөздүү (2:1), б.а. биринчилик ячейка эки сырткы кремкычкылтектуу тетраэдрдик торчодон жана аралык алюмокычкылтектуу октаэдрдик торчодон турат. 7-сүрөттө схематикалык түрдө монтмориллониттин структурасы көрсөтүлгөн. Монтмориллониттин тетраэдрдик жана октаэдрдик торчолору бири – бири менен бирдиктүү катмар пайда кылып жайгашышкан.

Монтмориллонитке аралашуулардан тышкары $(\text{OH})_4\text{Si}_8\text{AlO}_{20} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (катмар арасында суу) теоретикалык формуласы жана 66,7% SiO_2 ; 28,3% Al_2O_3 ; 5% H_2O теоретикалык химиялык курамы мүнөздүү.

Маршалл жана Хендрикс [13] көрсөткөндөй, 2:1типтеги торчолуу минералдар үчүн тетраэдрлик торчодо кремнийдин алюминийге же фосфорго оңой эле алмашуусу мүнөздүү, ал эми октаэдрлик торчодо алюминийдин магнийге, темирге, цинкке, никельге же литийге алмашуусу оңой болот.

Тетраэдрлик торчодо Si^{4+} дин $-\text{Al}^{3+}$ ге алмашуусу мүмкүн эмес. Октаэдрлик торчодо алюминийдин алмашуусу толук болот. Мисалы, октаэдрлик торчодо 2Al^{3+} дин 3Zn^{2+} ке толук алмашуусу соконит минералын пайда кылат, алюминийдин магнийге – сапонит, магнийдин литийге – гекторит.

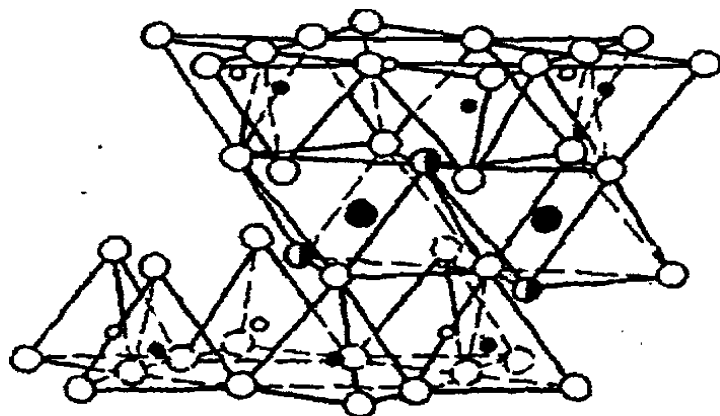
Грюнер [9] көрсөткөндөй, вермикулиттин структурасы триоктаэдрлик слюданын же тальктын катмарлары суу катмарлары менен бөлүнгөн учурда пайда болот. Акыркылары бул молекулалардын эки катмарындай болгон калыңдыгы 4,98 Å болгон белгилуу бир мейкиндик ээлейт. Мындай жол менен вермикулит табигый абалда слюда сымал менен суунун эки катмарынын алмашуусу аркылуу мүнөздөлөт.

Вермикулиттин жалпы формуласы :

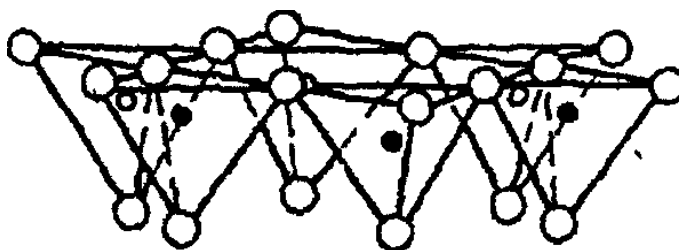


мында x —1ден 1,4ко чейин мааниге ээ, y —болжол менен 8; Mg^{2+} жана Ca^{2+} — тең салмакташтырган алмашуу катиондору.

Кээ бир учурда вермикулит монтмориллонит сыяктуу курамга ээ болот; бул учурда алардын ортосунда жалгыз гана айрымачылык - вермикулиттин бөлүкчөлөрүнүн чондугу болуп саналат.



Алмашуу катиондору $n H_2O$



Сүрөт 2.3.3. Монтмориллониттин структурасынын схематикалык көрүнүшү Гофманн, Энделл, Вилк [14], Маршалл [8] жана Хендрикс [13] боюнча:

Бул жерде, 1— кычкылтек; 2 — гидроксил; 3—алюминий, темир, магний; 4 — кремний же алюминий.

Катмардуу – ленталуу структуралуу минералдарга палыгорскит (аттапульгит) жана сепиолит кирет. Бул типтеги минералдардын структурасы эки (палыгорскит) же үч (сепиолит) лентадан турат. Акыркылары тетраэдрлардын негиздеринин узаруусу аркылуу шахмат түрүндө байланышат жана цеолит сымал канал пайда кылат [12].

Силикаттардын структураларын аныктоодо рентгенографикалык анализдин өнүгүүсүнүн баштапкы стадиясында бул структураларды идеалдаштыруу оңой жана мүмкүн деп эсептелген. Жогоруда каралган чопо минералдарынын структуралык моделдери да жалпысынан идеалдуу. Бирок откон кылымдын отузунчу жылдарында эле мындай моделдерди жакындатылган гана моделдер сыяктуу кароо керектиги айтылган. Хендрикс жана Джефферсон [13] слюдалардын полиморфтуу модификацияларында силикаттык катмарлар,

катиондордун аралык мейкиндикте жайгашуусуна жараша, эки ача мүнөзгө ээ экендигин божомолдошкон.

Бүгүнкү күндө реалдуу кристаллдардын проблемасы - чопо минералдарынын физикасынын негизги проблемасы. Рентгенографиялык жана электронографиялык анализдердин теориясынын жана техникасынын өнүгүүсү, ошондой эле структуралык маселелерди чечүү үчүн колдонулган инфракызыл спектроскопия методу жакшы жетишкендиктерге алып келүүдө.

Изилдөөлөрдүн [8, 15] жыйынтыктары көрсөткөндөй, идеалдуу калыптанган кристалл – торчонун трансляциясынын баардык үч багытында чектелбеген улануулар. Толук калыптанбагандыктын себептеринин бири кристаллдардын көлөмүнүн чектелүүсү. Мындай дифракциондук эффекттер максимумдун туурасынын чоңойушу менен мүнөздөлөт. Баардык көлөм боюнча чектелүүлөр дайыма бирдей эмес. Катмардуу структурага ээ чопо минералдарына жалпак эки чендуу кристаллдар мүнөздүү.

Статистикалык дефекттер — кристаллдардын кээ бир аймактарындагы кристаллографикалык катнаштардын бузулуусу — калыптанбоонун негизги тобу. Аймактын мындай бузулуулары аларды куурчап турган кристаллдык торчолорго таасирин тийгизет. Көлөмү боюнча дефектилер нөлдүк, бирдик жана экилик болуп классифицирленет.

Нөлдүк көлөмгө, торчодогу бир атому башка атом менен алмашкан чекиттүү дефектилер ээ [9, 16]. Бул алмашуулар тетраэдрлик, октаэдрлик жана катмарлар арасы катиондордун курамынын өзгөрүүсүнөн улам болушу мүмкүн. Ошондуктан аларга изоморфизманын таасиринин ар түрдүү формасы мүнөздүү.

Торчодогу иондордун стехиометрикалык эмес алмашуулары чопо минералдарынын кристаллдык торчолоруна таасир этет. Кремний кычкыл тетраэдрларында Si^{4+} дин Al^{3+} ге алмашуусу алардын орточо көлөмүн чоңойтот жана акырында Si—O байланышынын чондугун өзгөртөт [13, 17].

Изоморфтуу алмашуулар, чекиттүү дефектилердин башка түрлөрүндөй эле рентген диагностикасына берилбейт. Аларга изилдөөнүн андан да ичке физикалык методу керектелет.

Бир чендүү же сызыктуу дефектилер, аларга таандык мозаикалык структуранын эсебинен кристаллдык торчонун дислокациясы менен таанылат

жана дебаеграмма сызыктарынын көрүнүктүү кеңейүүсүнө алып келет. Ошондуктан аларды рентген ыкмалары аркылуу оңой эле табууга болот [8, 17, 18, 19]. Эки чендүү дефектилер катмарлардын жыйнагынын бузуулусунда байкалат.

Катмарлардын ирээттүүлүгүнүн бузулуусу менен байланышкан чопо минералдарынын структурасынын дефектилери тууралуу Бриндли [20, 21], Звягин [22], Куковский [23] ж.б. изилдөөлөрүндө кеңири айтылган.

Чопо минералдарындагы дефектүү структуралар тууралуу көрүнүштөрүнүн бири — аралаш катмардуу жаралыштар. Алар ар кандай чопо минералдарынын структуралык бөлүкчөлөрү. Акыркы изилдөөлөргө ылайык, мындай аралаш катмардуу бөлүкчөлөр чопо минералдарында кеңири тараган. Бул чопо минералдарынын көбү эки чендуу структурага ээ экендигин тастыктайт. Аралаш катмардуу жаралыштардын кристаллохимиясынын суроолору тууралуу изилдөөлөр Франк-Каменецкийге таандык [10].

Демек, чопо минералдарынын көп кездешкен структураларынын изилдөөлөрү баардык дисперс минералдарынын физикалык жана химиялык касиеттеринин көбү алардын кристаллохимиялык структурасы менен тыгыз байланышта экендигин көрсөтүп турат.

2.4. Бентонит

Бентонит чопосунун негизги минералы монтмориллонит (монтмориллониттин саны эң аз 75%ды түзөт) эсептелинет. Монтмориллонит смектит тобуна кирет. Ошондой эле коллоиддик өзгөчөлүктүү алюмосиликаттардын тизмесинен болот. Бентониттин курамында монтмориллониттен башка гекторит, нонтронит жана сапониттер камтылат [24]. Бентонитте монтмориллонит минералы көп болгондуктан, аны түздөн-түз монтмориллонит деп атасак да болот. Жалпысынан, монтмориллонит ээ болгон өзгөчөлүктөргө, бентонит да ээ болот. Суу менен байланышууда шишийт (көбөт), кислота менен активдештирилет, бургулоо эритмесин коюлаштырат, ошондой эле катион алмашуу жөндөмдүүлүккө жана чоң беттик аянтка ээ болгон чопонун түрү болуп саналат [25].

Негизинен бентониттин эки түрү аныкталган. Биринчи топтогу бентонит сууну сиңирип алуу жөндөмдүүлүгү чоң мааниге ээ. Экинчи топтогу бентониттерди кандайдыр бир даражада нымдаса да сууну сиңире албайт, анткени анын сууну сиңирип алуу жөндөмдүүлүгү жок.

Бентониттен натрий жана кальций монтмориллонит, активдештирилген чопо жана органоchoполор иштетилип, ар бири ар кандай өзгөчөлүктөргө ээ болуп ар түрдүү сфераларда колдонулат. Европалык Бентонит Бирикмесинин айтуусу боюнча курулуш инженерия, бургулоо, майлар, азык-түлүк, айыл чарба, дарыкана, косметикалык жана медициналык сферада, боёктор, жана тазалоочу, кагаз, керамика, катализатор катары пайдалануу сфералары абдан көп болуп саналат.

2.4.1. Бентониттин минералогиясы

Бентонит жанар тоо күлдөрүнүн талкалануу натыйжасында пайда болгон көп сандагы монтмориллонит минералын $(\text{Na,Ca})_{0,33}(\text{Al,Mg})_2(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ камтыган, тыгыздыгы 2.2-2.7 г / см³ жана ийилчээктүү табигый чопо болуп эсептелинет [26].

Бентониттин уникалдуу техникалык өзгөчөлүктөрү чопонун минералогиялык түзүлүшү менен түздөн-түз байланышкан [27]. Бентониттин сууну адсорбциялоо касиети менен катион алмашуу жөндөмдүүлүгү пластик чополор жана каолиндерге караганда жогору болот. Кээ бир бентониттерде сууну сиңирип алуусу көлөмүнүн көбөйүшү менен коштолот [28].

2.4.2. Бентониттин химиялык жана структура-механикалык касиеттери

Бентониттердин химиялык жана структура-механикалык касиеттери, ошондой эле алардын түзүлүшүнүн өзгөчөлүктөрү көпчүлүк учурда кристаллдык структуранын ирээттүүлүгүнөн, катмардагы катиондордун алмашуусунан, катмарлар арасы комплекстин мүнөзүнөн көз каранды болот. Ошондой эле касиеттеринин өзгөрүшүнө алмашуучу катиондордун жаратылышы да чоң таасир этет.

Бентонит чополурунун эң негизги касиеттеринин бири – өз алдынча диспергациялануусу. Диспергация процессинде жыйынтыкталбаган структуралык элементтердин пайда болушу мүмкүн. Аларды нанобөлүкчөлөр же плейтлеттер катары кароого болот. Элементардуу плейтлеттердин узун тууралары ондогон нмден жүздөгөн нмге чейин болот жана калыңдыгы 1ден 1,5 нмге чейин болот. Так калыңдыгы суунун адсорбциондук молекуласынан көз каранды болот. Элементардуу плейтлеттер, көлөмү октаэдрлик жана тетраэдрлик катмарлардагы изоморфтуу алмашуулар менен аныкталган терс зарядка ээ. Заряд, катмарлар арасындагы мейкиндикте элементардуу плейтлеттер арасында жайгашкан суунун бир же эки катмардуу катиондору менен нейтралдашат. Элементардуу плейтлеттердин топтору чопо бөлүкчөлөрүн пайда кылат. Эгерде бул бөлүкчөлөрдү сууга салса, анда суу катмарлар арасы мейкиндикке кирет жана чопо бөлүкчөлөрү көбүп чыгат. Ушундай жол менен, бир канча элементардуу плейтлеттерден турган чопо бөлүкчөлөрүн суу суспензиясына трансформирлесе болот. Плейтлеттердин жана чопо бөлүкчөлөрүнүн негизги касиеттеринин бири, алардын өз алдынча уюшумдуулугу жана ошону менен бирге суспензиялар белгилүү түзүлүшкө ээ болот жана гель сымал абалга келишет.

Гидрофилдүүлүк, ион алмашуу касиети жана структура-механикалык касиеттери кристаллдардын түзүлүшүнүн аномалиясына, б.а. стехиометрикалык алмашуусуна, түзүлүшүнүн ирээтсиздигине, комплекстин катмарлар арасы мүнөзүнө караганда дисперстүүлүгүнө азыраак сезгичтүү. Мындан тышкары бул касиеттери структура үчүн өтө төмөн мааниге ээ болот.

Бентониттин ион (катион) алмашуусунда ак, боз, күрөң, мала кызыл, ал тургай, кара түстөрүн байкоого болот [29]. Негизинен экологиялык катиондордун жалпы катион алмашуу жөндөмдүүлүгү 20% га жакын гана болуп саналат. Бирок, октаэдр түзүлүшүндөгү Al^{+3} менен Mg^{+2} чополордо катион алмашуу жөндөмдүүлүгү 80%га жакын, тетраэдр түзүлүштөгү чополордо Si^{+4} менен Al^{+3} бири-биринин ордуна алмаштырылат. Октаэдр түзүлүшүндөгү гидрокситтердин суутеги начар байланышта болгон үчүн Na, K, Ca, Mg жана NH сыяктуу иондор менен орун алмашат. Катиондордогу ион алмашуу жөндөмдүүлүгүнүн күчү азынан көптү карай Na, K, Ca, Mg жана NH турат. Бир чопонун катион

алмашуусунун мүнөзү рН ка байланыштуу болот. Мисалы, чопонун рН = 9 болсо, бунун алмашкан катиону Na болот, рН = 7.5 болсо – Ca катиону, рН = 7 ден аз болсо, анда H катиону болуп саналат [26].

Монтмориллонит чопосунан адсорбциялык таасири менен ууланууга каршы жогорку эффективдүү энтеросорбциялык дары-дармекти алышкан [30]. Бентонитти активдештирип, шараптарда кармалган калий, натрий, магний иондорунун концентрациясын 25-40% чейин, ошондой эле оор металлдардын катиондорун 20-40% азайтууга алып келет, демек бул көрсөткүчтөр шараптардын сапатына жана туруктуулугуна жакшы таасир берет [31]. Бентониттер органикалык жана органикалык эмес да заттарга (микотоксиндерге, боёгучтарга) жогорку сорбциялык жөндөмдүү болушат, ошондуктан аларды колдонуп колония түзүүчү бирдиктерди (E. Coli жана St. aureus) 15-30 эсе азайышына жардам берет [32].

2.5. Монтмориллонит чопосунун касиеттери жана структураларынын негиздери

Азыркы күндө кванттык химиянын жана молекулярдык динамиканын методдору колдонууда кеңири тараган молекулярдык, кристаллдык жана өтмө (нано) өлчөмдөрдөгү оор системалардын электрондук жана атомдук сандык моделдөөдө колдонулат. Атомдордун, молекулалардын молекулярдык ансамблдер жана кристаллдык кванттык химия төмөнкү кванттык-механикалык талашсыз жоболорго таянат:

Табигый илимдердин аймагындагы көпчүлүк ачылыштар бизди курчап турган ааламдын түзүлүшү жана кыймылы жөнүндөгү көрүнүштөрдүн өнүгүшү менен байланыштуу. Бул фундаменталдык тартип (дисциплина) атомдук – молекулярдык деңгээлдеги химиялык кублуштарды жана процесстерди изилдөөдөгү кванттык механикалык мыйзамдардын тиркемелерин карайт. Кванттык химия атомдорду, молекулаларды ансамблдери менен кристаллдарды байкоого кванттык механиканын талашсыз жоболоруна таянат.

Кванттык химияда Штрейгиндердин тең салмактуу чечими болуп эсептелген жана бөлүкчөнүн координатына көз каранды химиялык системанын абалынын

мүнөзү толкундуу кыймыл (функция) түшүнүгү манилүү болуп эсептелинет. Бул тең салмактуулук толкундуу кызматтарды белгилүү бири-бири менен байланышта жайгашкан электрондук сандар жана ядролор менен энергиянын абалынын мүмкүнчүлүктүү маанилери менен байланыштырат. Толкундуу кыймылдарды билүү менен электрондук зарядды бөлүштүрүүнү, молекулалык моменттерди эсептөөнү, анын спекироскопиялык жана резонанстык мүнөздөмөсүн табууну, анын реакциялык жөндөмдүүлүгүн сүрөттөөнү, кристаллдык зондук түзүлүшүн эсептөөнү жана башкаларды аныктоого болот. Толкундуу кыймылдардын жөнөкөй системалары үчүн эсептөө саналат, ал эми практикалык кызыгууну көрсөтүүчү химиктер жана татаал системалар үчүн бул мүмкүн эмес. Ошондуктан эсептөөдө түрдүү божомолдорду киргизүүгө туура келет.

Негизги божомолдордун бири болуп, көпчүлүк кванттык химиялык эсептөөлөрдө колдонулган Борн-Оппонгеймердин божомолдоосу эсептелинет. Ал электронду жана ядролук абалды сүрөттөөдөгү толкундуу кыймылдарды ажыратып кароодогу идеяда негизделген. Дээрлик оор ядролор электрондорго караганда бир канча жай кыймылдашат жана сүрөттөөдө көпчүлүк электрондук толкундуу кызматтарды (функция) аныктоодо математикалык маселелер өтө жөнөкөйлөштүрүлөт. Мисалы, химиялык байланыштын теориясы мына ушул божомолдоодо түзүлгөн. Мындан аркы божомолдоолор түзүлгөн. Мындан аркы божомолдоолор электрондук кыймылдарга тиешелүү. Терс заряддалган электрондор молекулада бири биринен түртүшүү абалда болушат. Бул алардын кыймылына таасир берет коррелировандык болуп эсептелинет. Мына булар көп электрондук системалар үчүн толкундуу аракеттерди аныктоодо негизги кыйынчылыкты туудурат. Ошондуктан кванттык химиянын көпчүлүк ыкмалары электрондук кыймылдар коррелировалуу эмес деп, электрондун толкундуу кызматтарын издешет, аларды көз карандысыз деп эсептеп, божомолдоодон чыгышат. Бирок бардык бөлүкчөлөр молекулада өз ара аракеттенишет, муну эске алышат. Берилген электронду киргизүү менен ирмемдеги башка электрондор жана ядролор менен өз ара аракеттенишин байкашат. Андыктан татаал система үчүн толкундуу кызматтарды эсептөө проблемасы жөнөкөйлөштүрүлөт, маселе башкаларга караганда орто талаадагы ар бир бөлүкчөнүн бир электрондук толкундуу кызматтарын аныктоого жыйынтыкталат.

2.5.1. HyperChem программасы

Бүгүнкү күндө кванттык химиянын ыкмалары жана молекулярдык динамикалар электрондук тариздөө жана молекулярдык татаал системаларда атомдук түзүм, кристаллдык жана өткөөл ченемдердин кеңири сандык жайылтышынча ээ болушту. Бул технологиянын өнүгүшү менен тиешелүү математикалык камсыздоо байланыштуу. Меню Setup эсептин ыкмасына тапшырма берет. Бул ар түрдүү базистердеги молекулярдык механика, жарым эмпирикалык квант-химиялык ыкмалар жана Хартри-Фоктун эмпирикалык эмес ыкмасы болушу мумкун.

Меню Setup энергетикалык, геометриялык жана электрондук параметрдин молекулярдык системада молекулярдык – механикалык жана кванто-химиялык эсептерти жүргүзүүчү операцияларды камтыйт. Андан кийин Setup менюсундагы керектүү опцияны тандап алгандан кийин, Compute менюсун колдонууга керектүү мүнөздөмөнү эсептөө жүргүзүү керек.

Системанын кубаттуулук жана алардын геометриялык тең салмактуулук төрт моделдүү таризди колдонуу менен молекулярдык механика ыкмасы менен (MM+, AMBER, BIO+, и OPLS), тогуз жарым эмпирикалык кванттык химиялык ыкма менен (Хюккелдин кеңейтилген ыкмасы, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/1 жана ZINDO/S)), же эмпирикалык эмес (ab initio) кванттык химиялык ыкма менен ар түрдүү базистерди HyperChem программасы эсептөөнү ишке ашыра алат.

HyperChem программасында молекулярдык изилдөөдөгү электрондук түзүлүштү төмөндөгүдөй жолдор менен эсетөөгө болот: жарым эмпирикалык эсептөө ыкмасын колдонуу менен же Setup менюсунда тандоо жүргүзүү менен Хартри-Фоктун эмпирикалык эмес ыкмасын колдонуу менен эсептерди жүргүзүүгө болот. Compute меню эсептердин бардык типтери үчүн жарым эмпирикалык эсептөө ыкмасын колдонууга болот.

Жадыбал 2.5.1.1. HyperChem программасындагы кээ бир түшүнүктөр.

Молекулярдык химия	Молекулярдык механика опциясын алгыла Молекулярдык кудуреттин эсебин алуу үчүн Ньютондун ыкмасын колдонуу керек
Жарым эмпирикалык	Молекулярдык механиканын ордуна молекулярдык системанын параметрин эсептөө үчүн квантты-химиялык эсептөө ыкмасын колдонууга жарым эмпирикалык жыйын (набор) мүмкүндүк берет.
Эмпирикалык эмес (initio)	Эмпирикалык эмес (Хартри-Фока) ыкма молекулярдык механиканын ордуна кванттык химиялык ыкманы же жарым эмпирикалык ыкманын бирин колдонууга мүмкүндүк берет.
Периодикалык куту	Периодикалык куту-бул пункту тандоо-суунун молекулаларын камтуучу молекулярдык системасын периодикалык кутуга салуу
Чектелүү	
Ылдамдыкты берүү	Ылдамдыкты берүү пункту системага кирүүчү атомдордун ылдамдыгынкалыбына келтирүүгө мүмкүндүк берет
Тармактарды колдонуу менен эсептөө	Бул пункт молекулярдык-механикалык, жарым эмпирикалык жана эмпирикалык эмес ыкмаларды эсептөө үчүн алынып ташталган серверди колдонууга мүмкүндүк берет
Параметрлер жыйынын топтоо	Бул пункт молекулярдык механика үчүн альтернативдик жыйынды топтоого мүмкүндүк берет
Параметрлердин файлдарын	Бул пункт HyperChem программасын колдонуу менен текст түрүндөгү параметрден жаңы файл тузүүгө мүмкүндүк берет
Реакция картасы	Бул пункт продуктулардын реакциясына жол табат, өткөөл издөөгө мүмкүндүк берет. Реагенттик жана продуктулардын реакциясын тандап алганга чейин бул тандоо пассивдүү бойдон кала берет

Жарым эмпирикалык ыкмалар аныкталган айрым жакындашуу жана жөнөкөйлөтүүнү колдонуу менен атомдор жана молекула үчүн Шредингердин теңдемесин чыгарышат. Бул топтун бардык ыкмалары: эсептөө валенттик электрондор үчүн гана жүргүзүлөт; аныкталган өз ара аракеттердин интегралдарына көңүл бурбайт; тажрыйбада алынган кээ бир параметрлер колдонулат жана электрондук орбиталдардын стандарттык ыңгайлаштырылбаган базистин аракеттери колдонулгандыгы мене мүнөздөлөт. Тажрыйбалык параметрлер бир катар чоңдуктун эсептөө муктаждыгын жоет жана жакындаштыруунун тыянактарынын кемчилдиктерин түзөйт.

Эске тутуу керек, HyperChem программасында жарым эмпирикалык ыкмалар Менделеевдин таблицасындагы бардык элементтерди талдап чыкпашы мүмкүн тигил же бул файл параметрине киргизилген гана параметрлерди талдашы мүмкүн. HyperChem программасындагы көпчүлүк жеткиликтүү жарым эмпирикалык ыкмалар эсептөөнү четтетүү үчүн схеманы киргизишет, маанилүү жүрүшүндө өтөт, негизинен – катар интегралдарды жабуу эсеби, ал эми INDO (Intermediate Neglecting of Differential Overlap) ыкмасы интегралдардын кагылышуусун эсептебейт. Мисалы, молекулалардын механика ыкмасынын рамкасында эритүүчү калган белок жана молекуланын бөлүгүн эске алуу менен, эсептөөнүн жарым эмпирикалык ыкмасын колдонуу менен белоктун активдүү борборунун электрондук түзүлүшүн окуп үйрөнүүгө болот. Бул үчүн эсепти баштоонун алдында select менюсунун колдонуу менен системаны керектүү бөлүгүн белгилеп алып, андан кийин comput жана setup менюсуна тиешелүү параметрди киргизгиле. Чийип алуу керек, мындай эсептөөлөрдү төмөнкү учурда гана жүргүзүүгө болот; эгер системанын белгиленген бөлүгү формалдуу химиялык байланыштар молекулярдык системанын калган бөлүгү менен бирикпесе. (мисалы, белоктун моделин түзүү менен биз изилдей турган электрондук түзүлүштү, тиешелүү химиялык байланыштын активдүү борборун өчүрүп таштоо керек, андан кийин select менюсунун түрдүү жолдорун колдонуу менен активдүү борборун бөлүп алуу керек, же керектүү бөлүккө бир атомду бөлүп алуу керек. Мисалы, Molecules параметрин тандап алып жана L баскычын басуу менен активдүү борборду бөлүү керек, андан кийин select менюсунда Extend to sp3 пунктун тандап алуу керек, мындан бардык молекулярдык система

бөлүнүп чыгат, тандаган химиялык HyperChem программасы атомдордун белгиленген гана бөлүгүн эсептейт, ал эми калгандарын жөн гана атом потенциал катары карайт. Геометриянын ыңгайлаштыруу процессинде атомдордун белгиленбеген бөлүгүн координаттар туруктуу келишип, эсептөө жүргүзүү учурунда өзгөрүлбөйт).

Хюккелдин кеңейтилген ыкмасы молекулярдык орбиталды эсептеп чыгаруу үчүн дайындалган жана молекулярдык – динамикалык эсептөөлөрдү жүргүзүүгө жана геометрияны ыңгайлаштырууга жол бербейт. Анда өз ара аракеттенбеген электрондордун ((SCF)) өз алдынча макулдашылбаган жакындашуусу колдонулбайт.

CNDO ыкмасы (Complete Neglect of Differential Overlap, дифференциалдын жабуу толугу) SCF жөнөкөй ыкма болуп эсептелет. Ал толук кубаттуулук жана геометрияны ыңгайлаштыруу ар ачык жана жабык жел кабакчалар менен системанын электрондук мүнөзүнүн негизги абалын эсептөө үчүн колдонулат.

INDO ыкмасы (Intermediate Neglect of Differential Overlap, дифференциалдык жабуу менен бөлүп – бөлүп көңүл бурбоо). CNDO ыкмасы бир атомдук борбордо электрондордун кагылышуу эсебинин негизинде жакшырат. Толук кубаттуулук жана геометриянын ыңгайланышы, ачык жана жабык жел кабакчалар менен системанын негизги абалын эсептөө жүргүзүүгө макулдук берет. Бул SCF ыкмасы.

MINDO3 ыкмасы (Modified INDO, version 3, жакшыртылган ыкма INDO, версия 3) INDO ыкмасынын кеңейиш жана мындан ары өнүгүшү менен эсептелет. Көпчүлүк өз ара аракеттер үчүн анда тиешелүү эсептеп чыгаруунун ордуна эмпирикалык параметрлер колдонулат. Бул ыкма толук кубаттуулук жана геометриянын ыңгайланышып эсептөөдө ачык жана жабык жел кабыкчалар органикалык молекулалар үчүн жакшы жыйынтыктарды алууга мүмкүндүк берет. Бул SCF ыкмасы.

MNDO ыкмасы MINDO3 ыкмасынын андан ары өнүгүшү болуп эсептелет, акыркынын кемчилдиктерин оңдойт. Биринчи жана экинчи башкы топтордогу атомдорду камтыган электрондук жана атомдук түзүлүштөгү органикалык молекулалардын эсебин сапаттуу жүргүзүүгө мүмкүндүк берет (бирок өтүп туруучу элементтердин атомдору эмес). Бул ыкма жылуулуктун пайда болушу эсептөөдө

чоң органикалык молекулалар үчүн жакшы жыйынтыктарды алууга мүмкүндүк берет. Бул SCF ыкмасы.

AM1 ыкмасы MNDO нун жакшыртылган ыкмасы болуп эсептелет. Так ыкмалардын бири. Мезгилдик системанын 1-чи жана 2-чи топтун башуу элементтерин камтуучу органикалык молекулалар үчүн колдонулат. MNDO ыкмасына салыштырмалуу кычкылтек жана азотту камтуучу молекулалар үчүн сапаттуураак жыйынтык алууга мүмкүндүк берет. Электрондук түзүлүштү эсептеп чыгарат, геометрияны ыңгайлаштырат, жылуулуктун пайда болушун жана толук кубаттуулукту эсептеп чыгат. Бул SCF ыкмасы.

PM3 ыкмасы AM1 ыкмасынын жаңы версиясы болуп саналат. PM3 AM1 ден параметринин чоңдугу менен гана айырмаланат. PM3 үчүн параметрлер чоң санга салыштырмалуу жана эсептөнүн жыйынтыгы менен тажрыйбанын түрүнөн алынган. Эреже катары, PM3 ыкмасында коваленттик өз ара аракеттенүү аз кагылушууну болуп эсептелет. AM1 ге караганда PM3 органикалык молекулаларды эсептөөгө арналат. Андан башка бир катар элементтердин топтору үчүн параметрленген, эски методдор үчүн дагы белгиленген. Бул SCF ыкмасы.

ZINDO/1 ыкмасы эски элементтердин атомдорун кошуп алуучу молекулярдык эсептерин жүргүзүү үчүн ыңгайлашылган INDO/1 ыкмасы акыркы версияга эквиваленттүү, бул түп нускадан эсептөөгө мүмкүндүк берет.

ZINDO/S ыкмасы INDO ыкмасынын версиясы болуп эсептелет. Уфнин жаралышы үчүн жана көрүнүктүү оптикалык өткөөл конфигурациялык өз ара аракеттерди (C1) бир бөлөк дүүлүккөнү: эсептөөгө ылайыкталган.

УФ жана көрүнүктүү спектрди болжолдоо үчүн пайдалуу, бирок молекулярдык динамиканы же геометрияны оңойлоштура албайт. Жарым эмпирикалык эсептөөлөрдүн параметрлерин тактоо үчүн тандалган жарым эмпирикалык ыкманын диалогдук айнегин (окно) алуу керек, бул диалогдук менюнун эки версиясы бар (кийинки бөлүмдү кара). Бул таблицада химиялык элементтер көрсөтүлгөн, алар тигил же бул жарым эмпирикалык ыкмалар менен эсептеле алынат. Ошондой учурда эгер элементтин символу таблицада болсо, HyperChem программасында берилген жарым эмпирикалык ыкмада орбиталдык кванттык сандар менен тиешелүү валенттик электрондордун катышы менен интегралдарды эсептөө үчүн аныкталат.

Бирок азыркы убакта бардык атомдор үчүн эмес, айрым атомдор үчүн тигил же бул жарым эмпирикалык ыкманы ишке ашыруучу программа бар, параметрлердин топтому (набор) белгилүү. Эгер белгилүү болсо, анда тиешелүү параметрлердин файлдарын өзгөртүүгө болот. Белгилүү параметрлер үчүн элементтер жана тиешелүү параметрлер файлына киргизилген, бул таблицада боёлуп көрсөтүлгөн.

Хюккелдин кеңейтилген ыкмасында бардык башка жарым эмпирикалык ыкмалардан айырмаланган эң жакшы диалогдук терезе (окно) колдонулат.

Total charge (системанын толук заряды) ядронун суммардык заряды менен жана системада толук сандагы электрондун ортосундагы айырмачылык эсептелип чыгат. Бүтүн эсептелген жана оң бүтүн эсептелген, терс жана катион үчүн – анион үчүн.

Ö Weight diffuseness (диффузия салмагы).

Башка топтордун атомдорунан турган түзүлүүчү органикалык молекула жана молекула үчүн сейрек кездешүүчү атомдук орбиталдык диффузиялуулугун эске алуу менен хюккелевдик константы көбөйтүүчүгө көбөйтөт. Ö d-orbitals on... (d – орбитали) бул пункт Si, P, S, Cl атомдору үчүн d – орбиталын эске алууга мүмкүндүк берет.

3. БӨЛҮМ.

ИЗИЛДӨӨ ОБЪЕКТИСИ ЖАНА ЫКМАЛАРЫ

3.1. Изилдөө объектиси

Лейлек районунан 38 км алыстыкта, 1350-1450 м абсолюттук бийиктикте жайгашкан Бешкент жатагынан алынган бентонит чопосу.

3.2. Изилдөө ыкмалары

3.2.1. Бентониттин физика-химиялык касиеттерин изилдөө методдору

Чопонун байытуусу

Чопонун курамында кварц жана темир оксид сыяктуу көп заттар бар. Ошондуктан колдонуудан мурун байытуу керек. Байытуу декантация ыкмасы менен жасалат.

Иштөө ирети төмөнкүдөй:

1. Чопону 20 $\mu\text{м}$ электен өткөрүлөт;
2. 1 литр дистирленген суу алып, 10 г чопо салынат;
3. Гомогендүү эритме болгуча магниттик аралаштыргыч менен аралаштырылат;
4. Эритмедеги керексиз заттарды (кварц куму ж.б.) чөктүрүү үчүн 24 саатка коюлат;
5. Суюк эритмеси алынып, центрифугада 15 мүнөт 5000 айл/мин ылдамдыкта бөлүнүп алынат.
6. Алынган суспензиянын суюк бөлүгүн алып термостатка 24 саат кургатылат;
7. Кургаган таза чопо петри чашкасына идишине салынып, эксикатордо сакталат.

Катион алмашуу жөндөмдүүлүгү (КАЖ)

Чопонун катион алмашуу жөндөмдүүлүгүн аныктоосу ANSI/ASTM C837-76 стандартына ылайык жасалат. Бул ыкмада белгилүү pH жана белгилүү концентрациядагы метилен көктүн чопо тарабынан адсорбцияланышы.

Иштөө ирети төмөнкүдөй:

1. Метилен көк эритмесинин 0,01 N даярдалат;

2. Чопо үлгүсүнөн 2 г, 300 мл дистирленген суу алынып, гомогендүү эритме алгыча механикалык аралаштыргычта аралаштырылат;

3. Эритменин рН мааниси 2,5-3,8 арасында болгондой кылып, күкүрт кислотасы менен жөндөлөт;

4. Метилен көк эритмесинен (0,01 N) 5 мл эритмеге кошуп, механикалык аралаштыргычта 1-2 мүнөт аралаштыруу керек;

5. Айнек таякчасынын жардамы менен алынган тамчы фильтр кагазына тамызылат жана түсүн белгилейбиз;

6. Стандартта көрсөтүлгөн түстү алуу керек.

Анализдин башында алынган тамчылар көк түстө жана тамчынын айланасы түссүз болот. Убакыт өткөн сайын чопонун адсорбтогон метилен көктүн саны жогорулаганы үчүн тамчылардын түсү барган сайын койуу болот. Койуу көк түсүнүн сыртында көгүш түс пайда болгучакты эксперимент уланат. Бул түстү алгандан соң керектелген метилен көктүн санын төмөнкү теңдеменин жардамы менен КАЖ эсептелинет:

$$\text{КАЖ} = (E \cdot V / W) \cdot 100 \text{ м-экв/100 г чопо}$$

E – метилен көк эритмесинин концентрациясы, N; V – керектелген метилен көк эритмесинин саны, мл; W – чопонун массасы, г.

Жадыбал 3.2.1.1. Изилденүүчү чопонун катион алмашуу жөндөмдүүлүгү.

Чопонун жатагы	КАЖ, м-экв/100 г чопо
Бешкент	80

Нымдуулук

Нымдуулукту аныктоодо ГОСТ 3594. 15-93 эл аралык стандарты колдонулган. Чопонун нымдуулугун төмөндөгүдөй аныктадык. 10г дан 50 г га чейинки тартымды бюкса салып, 2-4 саат 105-110°C температурада кургаттык. Берилген убакыт материалдын түрүнө жараша болот жана биздин учурда нымдуулукту толук жок кылуу үчүн жетиштүү. Кургатылган үлгүлөрдү эксикатордо кургаттык жана 0,01г тактыкка чейин техникалык таразада тартып алдык. Нымдуулук төмөндөгү формула менен эсептелинет:

$$\frac{g_0 - g_1}{m} * 100\% = W$$

мында g_0 жана g_1 – кургатылганга чейинки жана кургатылган үлгүнүн массалары, m – кургатылган үлгүнүн массасы.

Эксперименталдык жыйынтыктар жадыбал 3.2.1.2.де берилген.

Жадыбал 3.2.1.2. Изилденүүчү чопонун нымдуулугу.

Чопонун жатагы	Нымдуулугу, %
Бешкент	4.5

Күйгүзүүдөгү масса жоготуу

Күйгүзүүдөгү масса жоготууну аныктоодо ГОСТ 3594. 11-93 стандарты колдонулган. Күйгүзүүдөгү масса жоготуу деп 800-1000⁰С температурага чейин ысытканда үлгүнүн массасынын төмөндөшүн айтабыз. Күйгүзүүдө үлгү суу, гумус, адсорбциялык газдарды жана бир аз хлориддерди жоготот. Күйгүзүүдөгү масса жоготууну 1-2 г үлгүнү аналитикалык таразада тартуу менен аныкташат. Үлгүлөр 105-110⁰С температурада алдын ала кургатылышы керек, андан сон фарфор тигелине салынып, 800-1000⁰С температурада 1-4 саат кармалат. Тигелдерди муфел мешинен алып чыгып, эксикаторго койдук. Муздагандан кийин таразага тарттык. Күйгүзүүдөгү масса жоготуунун санын аныктоо үчүн төмөндөгү формуланы колдондук:

$$\frac{g_0 - g_1}{m} * 100 - w = КМЖ, \%$$

мында g_0 жана g_1 – кургатылганга чейинки жана кургатылган үлгүнүн массалары, m – кургатылган үлгүнүн массасы, w -нымдуулук.

Алынган сан маанилер жадыбал 3.2.1.3.тө берилген.

Жадыбал 3.2.1.3. Изилденүүчү чопонун күйгүзүүдөгү масса жоготуусу.

Чопонун жатагы	КМЖ, %
Бешкент	5,19

Химиялык анализ

Чопонун химиялык анализи спектралдык ыкма менен «Стюарт Эссей энд

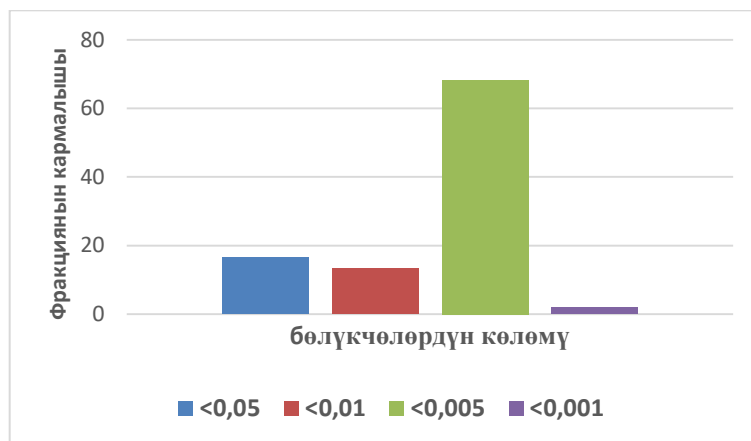
Инвайронментал Лэборэторис» лабораториясында Optima 5700DV Perkin Elmer жабдыгында аткарылган. Көп элементтүү анализи атом-эмисиондук метод менен индуктивдүү байланышкан плазманын жардамы менен жүргүзүлгөн. ИСП-ОЭС ыкмасы менен, суу үлгүсүндө, бир мүнөттө 35 элементти аныктоого болот. Жакшы метрологиялык мүнөздөмө алуу үчүн, ар бир жаны үлгүнү салгандан кийин плазма жана үлгүнүн ортосунда тең салмактуулук пайда болуу үчүн, 15-30с күтүү керек. Чопо үлгүлөрү төмөндөгүдөй даярдалат: 20 г алдын ала кургатылган үлгү алынат, ESSA миксеринде бөлүкчөлөрдүн көлөмү 0,027мм болгонго чейин майдаланат. Андан соң чопонун ичиндеги баардык компоненттер эритмеге өтүүсү үчүн көп кычкылдуу ажыратуу жүргүзүлөт. Ал үчүн изилденүүчү чоподон 0,2 г үлгү фторопласт стакандарына алынып, дистирленген суу менен нымдалат. Анан 10 мл HF, 10 мл үч кычкылдуу аралашма (HNO₃, HCl, HClO₄), 1:2:2 катышында, куюлат. Үлгүдөгү туздардын нымдуулугу учуруу үчүн температурасы 250⁰С ысыткычка, үч саатка коюлат. Муздатылгандан кийин 10 мл 25% падыша арагы куюлат. Ысыткычта 20 мүнөт ысытылат. Үлгүлөр кайрадан муздатылып, 0,5 мл индий эритмеси кошулуп, чендүү колбага куюлат. Жакшы аралаштыргандан кийин 12 саат тыныктырылат. Эртеси күнү үлгүлөрдүн анализи жасалат. Анализди жүргүзүү шарты: t=17⁰С, корреляция коэффициенти 0.9995, психрометр боюнча абанын нымдуулугу 4,2. Алынган жыйынтыктар жадыбал 2.2.1.4.де берилген.

Жадыбал 3.2.1.4. Изилденүүчү чопонун химиялык курамы.

Оксиддер	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	MgO	CaO
Кармалышы,%	50.7	9.26	4.21	3.18	14.79
Оксиддер	Na ₂ O	K ₂ O	TiO ₂	H ₂ O ж.б. оксиддер	Күйгүзүү дөгү масса жоготуу, %
Кармалышы,%	3.1	5.06	0.56	9.14	5.19

Гранулометриялык анализ

Гранулометриялык курамын аныктоо төмөндөгүдөй түрдө жүргүзүлдү. Чопонун тартымын көлөмү 1л болгон цилиндрге салдык. Цилиндрге жалпы суспензиянын көлөмү 1л болгонго чейин дистирленген суу куйдук. Андан соң суспензияны жакшылап аралаштырып, атайын таблицада берилген убакытка коюп койдук. Берилген убакыт өткөндөн кийин, суспензияны чандатып албай, көлөмү 20см³ пипетка менен 25см тереңдиктен үлгү алдык. Пипеткадагы үлгүнү алдын ала аналитикалык таразага тартылган фарфор чашкага куйдук. Андан соң суспензияны суу мончосунда буулантып, 110⁰С температурада кургатуу шкафында турактуу массага чейин кургаттык. Чоподогу көлөмү <0,05мм, <0,01мм, <0,005мм, <0,001мм болгон бөлүкчөлөрдүн пайыздык кармалышын аныктоо үчүн цилиндрден үлгү алып ушундай эле жол менен аныктадык. Гранулометриялык курамын аныктоонун жыйынтыгы сүрөт 3.2.1.5. де берилген.



Сүрөт 3.2.1.5. Бешкент чопосунун гранулометриялык курамы.

3.2.2. Бентониттин адсорбенттик касиетин изилдөө методу

Чопонун сорбенттик касиеттерин аныктоо үчүн анын адсорбция өзгөчөлүгүн изилдөө керек. Алгач метилен көктүн негизги эритмеси 2000 мг/л даярдалат. Негизги эритмесинен 5 түрдүү концентрациядагы (200 мг/л, 250 мг/л, 300 мг/л, 350 мг/л, 400 мг/л,) эритмелер суюлтулуп алат. Ар бир концентрациядагы эритмеден 50 мл мензурканын жардамы менен өлчөнүп, 150 мл конус түрүндөгү колбаларга куюлат. Даяр болгон колбаларды туруктуу ылдамдыкта (150 айл/мин)

жана ар түрдүү температураларда (293K, 303K, 308K) суу мончосунда 4,5 саат титиретилет. Андан соң бентонитти центрифуганын ($\lambda_{\text{макс.}}=664$ нм) өткөрүлөт. Баланстагы адсорбция сыйымдуулугу төмөнкү формула менен эсептелинет:

$$q_e = (C_0 - C_e) * V/m$$

q_e - баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, мг/г; C_0 - метилен көктүн баштапкы концентрациясы, мг/л; C_e - метилен көктүн баланстагы концентрациясы, мг/л; V – метилен көктүн көлөмү, л; m – чопонун массасы, г.

Тең салмактуу изотермага температуранын таасири

Изотерма параметрлерин иштеп чыгуу маанилүү шарт болуп саналат. Ленгмюр жана Фрейндлих адсорбция изотермалары анализделген. Ленгмюр адсорбция изотермасы эң белгилүү адсорбция изотермалардын бири болуп эсептелинет. Бул изотерма негизинен суюк эритмедеги эриген затты сүрөттөө үчүн колдонулат жана төмөнкүчө жазылат:

$$q_e = q_m * K_a * C_e / 1 + K_a C_e$$

q_e - баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, мг/г; q_m – баланстагы максимум адсорбция сыйымдуулугу, мг/г; K_a - баланстагы адсорбция турактуулугу, л/мг; C_e - метилен көктүн баланстагы концентрациясы, мг/л.

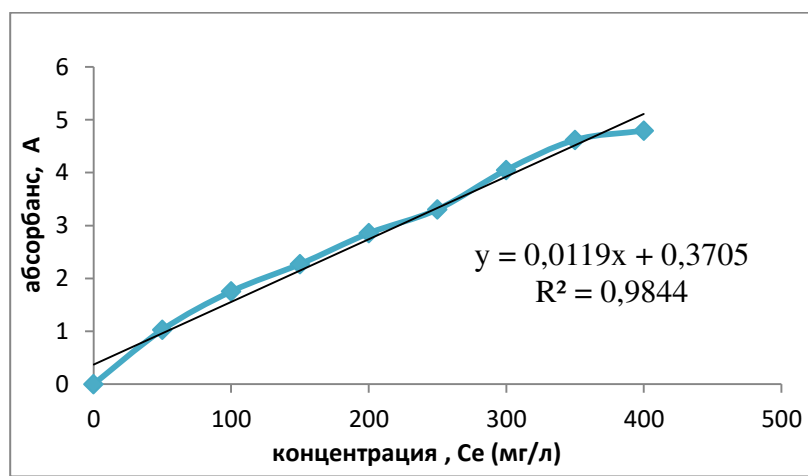
Фрейндлих изотермасы алгачкы изотермалардын бири болуп эсептелинет. Бул канааттандыраарлык эмпирикалык изотерма болгондуктан, суюлтулган эритмелердин адсорбциясында колдонсо болот. Адсорбция изотермасы төмөнкү формула менен эсептелинет:

$$q_e = K_F C_e^{1/n}$$

q_e - баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, мг/г; C_e - метилен көктүн баланстагы концентрациясы, мг/л, K_F , $1/n$ – эмпирикалык турактуулуктары.

Төмөнкүдө көрсөтүлгөн графикти метилен көктүн баланстагы концентрациясын аныктоодо колдонулган. Бул графикти алгач алынган

концентрацияларды эксперименттин башында спектрофотометрдин жардамы менен А (адсорбент) маанилерин өлчөнүп, калибрлөө ийри сызыгы алынат.

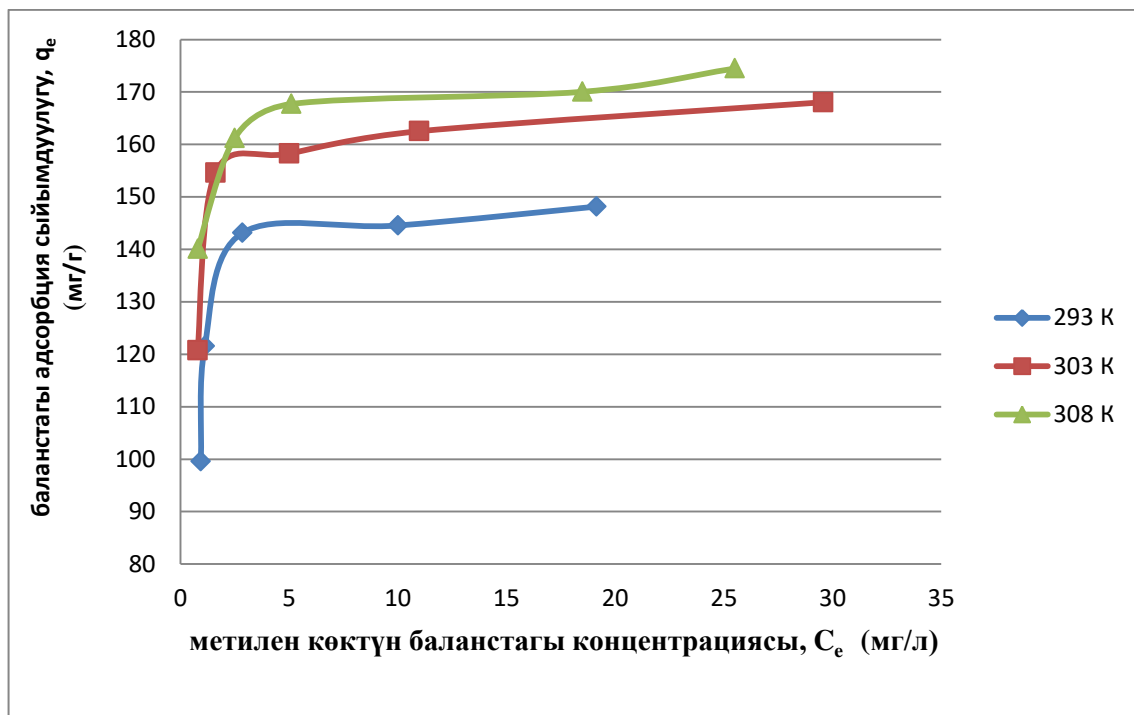


Сүрөт 3.2.2.1. Калибрлөө ийриси.

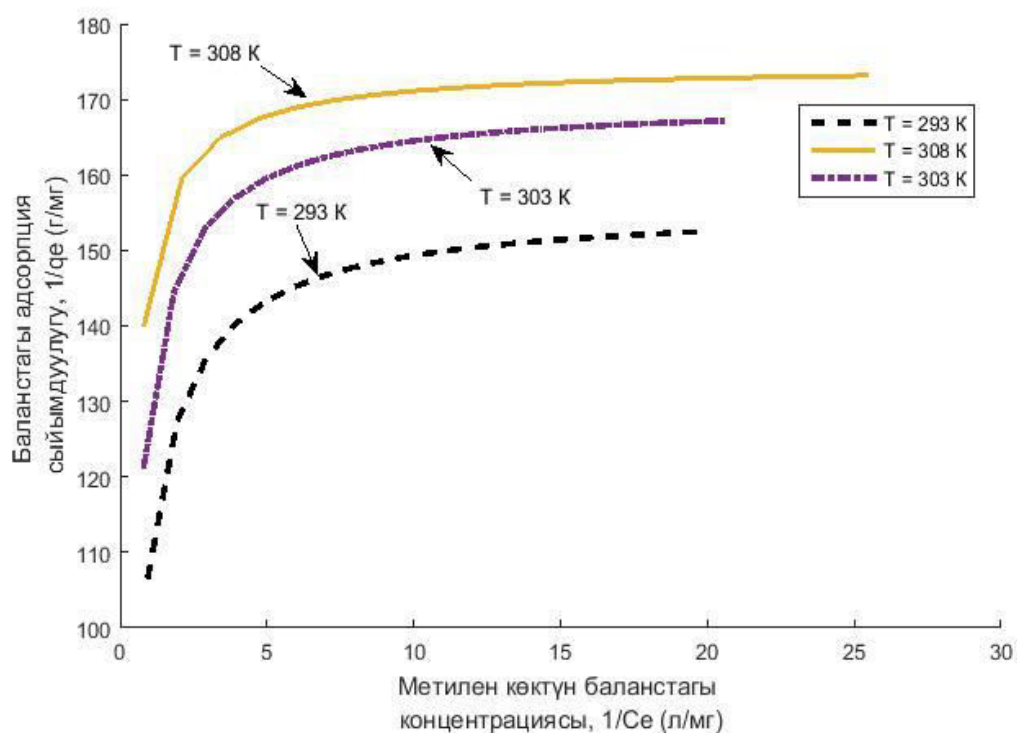
Андан соң эксперименттин аягында алынган метилен көк эритмелеринин А (адсорбент) маанилерин спектрофотометрде өлчөнөт. Жогорудагы сүрөт 3.2.2.1. графигинде көрсөтүлгөн теңдеменин жардамы менен метилен көк эритмесинин баланстагы концентрациялары эсептелип алынат.

Жадыбал 3.2.2.2. Метилен көк эритмесинин эсептелинген баланстагы концентрациялары.

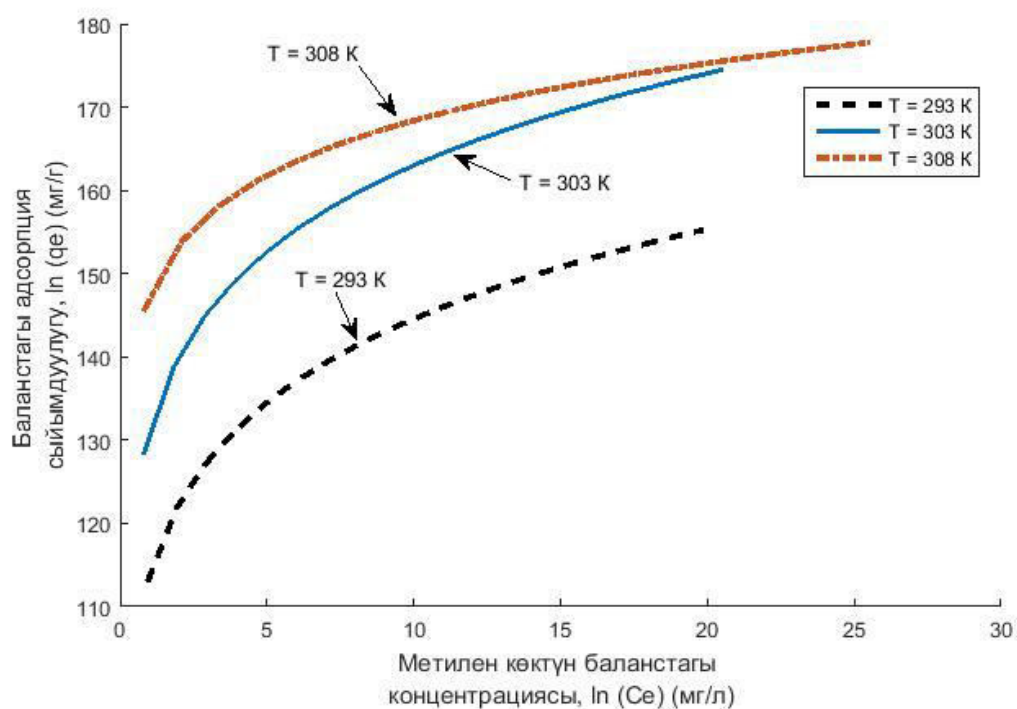
293 К		303 К		308 К	
Баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, q_e мг/г	Метилен көктүн баланстагы концентрациясы, C_e мг/л	Баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, q_e мг/г	Метилен көктүн баланстагы концентрациясы, C_e мг/л	Баланстагы адсорбция сыйымдуулугу, q_e мг/г	Метилен көктүн баланстагы концентрациясы, C_e мг/л
99,58	0,9412	120,77	0,7981	140,09	0,8019
121,52	1,1250	154,63	2,6172	161,23	2,5010
143,12	2,8485	158,26	5,0109	167,71	5,1046
144,55	10,0109	162,52	10,9837	170,04	18,4956
148,16	19,8465	168,04	29,5693	176,48	25,5109



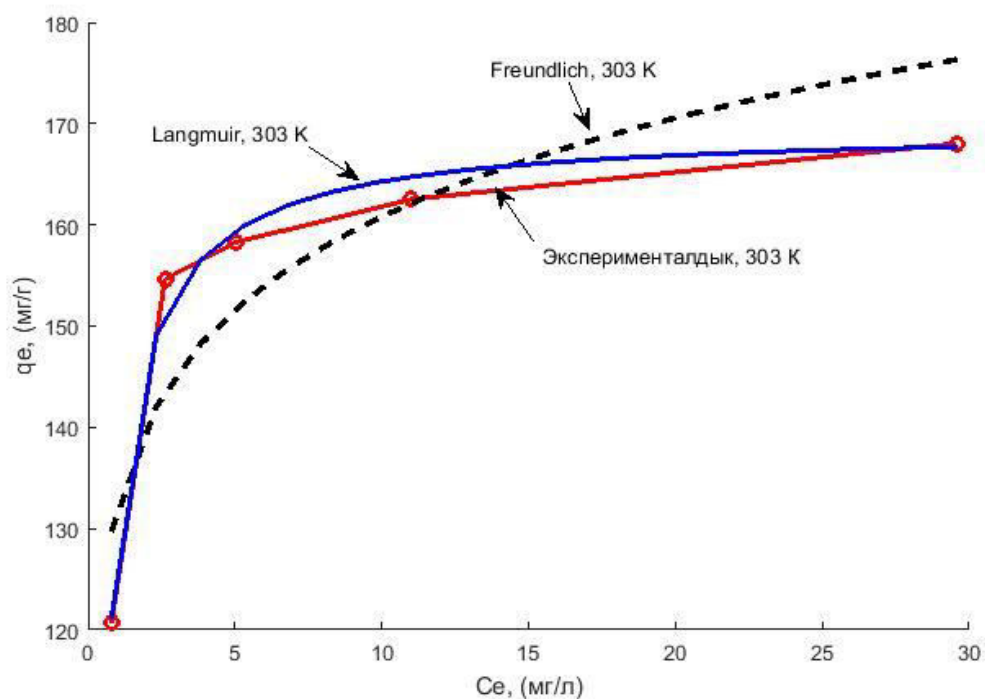
Сүрөт 3.2.2.3. Түрдүү температурадагы тажрыйбалык адсорбция изотермасы.



Сүрөт 3.2.2.4. Түрдүү температурадагы Ленгмюр адсорбция изотермасы.



Сүрөт 3.2.2.5. Түрдүү температурадагы Фрейндлих адсорбция изотермасы.



Сүрөт 3.2.2.6. 303К деги Фрейндлих, Ленгмюр жана эксперименталдык адсорбция изотермалары.

Жадыбал 3.2.2.7. Алынган жыйынтыктар.

Изотермалар		Температура, (К)		
		293	303	308
Ленгмюр	q_m , (мг/г)	159	170	175
	K_a , (л/мг)	2.172	3.015	5.059
	r^2	0.788	0.805	0.791
Фрейндлих	$1/n$	0.104	0.086	0.058
	K_F	114	132	147
	r^2	0.889	0.865	0.759

Эң кичинекей чарчы ыкмасы менен Ленгмюр жана Фрейндлих изотермаларынын параметрлери эсептелинет. Алынган жыйынтыктар жогорудагы жадыбал 3.2.2.2. жана 3.2.2.7. де берилген.

3.2.3. Монтмориллонит чопосунун касиеттерин жана структурасын эсептөө методикасы

HyperChem терезелери (части окна)

Аталуу сабы иштеген файлдын атын көрсөтөт. Эгерде файл жаңы түзүлгөн болсо, аты untitled деп көрсөтүлөт. Меню сабы HyperChem менюсунун башка аттарын камтыйт.

File – файл

Edit – редакторлоо

Build – объектилерди тургузуу

Select – белгилөө

Display – көрсөтүү

Databases – маалымат базалары

Setup – орнотуу

Compute – эсептөө

Cancel – токтотуу

Script – скрипт

Help – жардам

Жабдыктар панели инструменттердин сол жак саптары сегиз инструменталдык куралдарын камтыйт, ал атом же молекуланы куруу, тандоо, көрсөтүү, жайгаштыруу жана которуу үчүн колдонулат.

Абал сызыгы кезектеги маалыматты көргөзөт, ошол учурда көрүнүп турган молекуладагы атомдун саны сыяктуу, эсептөө абалы энергияны же градиенттин

чоңдугун көрсөтөт. Эгер меню пунктун тандасак анда пунктун сүрөттөлүшү сап абалында көрүнөт.

Менюну башкаруу баскычтары өлчөм, которуу, кеңейтуу, HyperChem айнегин жабуу командаларын камтыйт. Ошондой эле алар башка айнектерди активдештирүүчү ачыкч командасын камтыйт.

Чычкады колдонуу

HyperChem де негизинен жумуш чычкандын жардамы менен жүрөт. Ал төмөнкү түрдө колдонулат:

- 1) Чекит – чекиттин которулушу (жылышы), мында курсор HyperChem айнегинен эмнени тандагыңыз келгенинин көргөзөт.
- 2) L – басуу, чычкандын сол баскычы менен басуу.
- 3) R – басуу, чычкандын оң баскычы менен басуу. R – басуу негизинен L – басууга карама-каршы.
- 4) Эки жолу басуу – чычкандын сол баскычы менен эки жолу бат басуу.
- 5) L – протяжка же R – протяжка – чычкандын оң же сол баскычын басуу менен коебербестен жылдыруу, иштөө жеринин жаңы ордуна курсордун жылуусу.
- 6) LR – протяжка – чычкандын сол баскычын басуу жана кармап туруу, андан кийин чычкандын оң баскычын жана курсорду иштөө жеринин жаңы ордуна жылдыруу керек.
- 7) RL – протяжка – LR – жылдыруу сыяктуу эле, бирок биринчи чычкандын оң баскычын басуу керек.

Чычкандын курсору формасын өзгөртө алат. Ал төмөндөгүдөй:

- 1.(Draw) инструменталдык сүрөттү тандап сол баскычты басабыз.



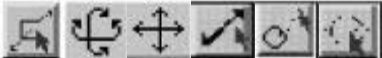
- 2.Курсорду иштөө жерине жылдырабыз. Курсор тиешелүү абалын алат.

- 3.(Select) инструменталдык сүрөтүн тандайбыз жана сол баскычты



басабыз

4. Курсорду иштөө жерине жылдырабыз. Курсор тиешелүү абалында алат. Ушундай эле калган алты баскычты тандоодо курсордун формасы

тиешелүү формага өзгөрөт. 

Клавиатуранын альтернативалары

HyperChem клавиатуралардын стандарттык альтернативаларын камсыз кылат. Клавиатуралык альтернативалардын менюсун ачуу үчүн, бир убакытта [Alt] жана [S] баскычын басабыз. (Select) тандоо менюсу ачылат.

Ушундай жол менен калган бардык меню блокторун ачса болот, [Alt] жана керектүү менюнун аталышынын башкы тамгасын бир убакытта басуу менен (мисалы, F тамгасы File үчүн ж.б). Ачык менюнун пунктуларынын бирин тандоо үчүн [Alt] жана меню пунктунун аталышына тиешелүү тамганы басуу керек. (мисалы, A тамгасы Atom үчүн).

Үлгү файлын ачуу (Sample File). HyperChem программасында молекулалар менен үч жол менен иштесе болот:

1. Инструменталдык ыкмалар молекуланын эки өлчөмдүү (2D) структурасын түзүү мүмкүнчүлүгүн берет жана андан кийин HyperChem модель түзүүчүсүнүн жардамы менен үч өлчөмдүү (3D) көрүнүшкө кайра өзгөртөт.

2. Калдыктарды тандоо HyperChem/Lite ичинен даяр аминокислоталардын жана нуклеозиддердин калдыктарын, белок жана нуклеин кислоталарын түзүү үчүн иреттүү түрдө тандоо мүмкүнчүлүгүн берет.

3. Окуу: HyperChem де кирүүчү файл (HIN файлы) же (файл ENT) ж.б катары сакталган атомдук жана молекулярдык координаттардын топтому.

Атомдордун жана молекулалардын таанытма белгисин колдонуу

Эгерде молекула атомдук заряддардын ж.б таанытма белгиси менен көрсөтүлсө, анда аларды төмөнкү жол менен өчүрсө болот:

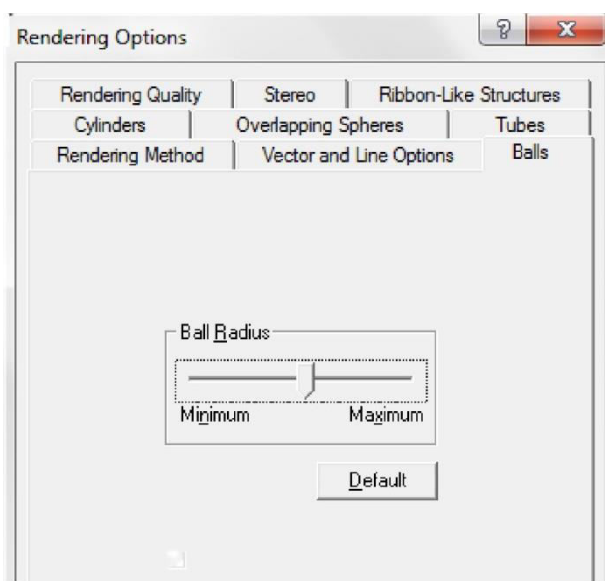
1. Чычкандын баскычы менен L – басуу, Labels ачуу.
2. Атомдун таанытма белгисинин тизмесинде автоматтык түрдө None деп белгиленип турат.

3. ОК дин үстүнө L – басуу атомдордун танытма белгисин токтотот. Диалог кутучасы жабылат жана таанытма белгиси көрүнбөй калат. Таатытма белгисин колдонуу үчүн диалог терезесинде керектүүсүн жана ОК ди басуу керек. Диалог кутучасы жабылат жана молекула тандалган символдору менен белгиленет (элементтердин химиялык сиволдору менен, заряддар менен ж.б).

Молекулярдык сүрөттөрдү колдонуу

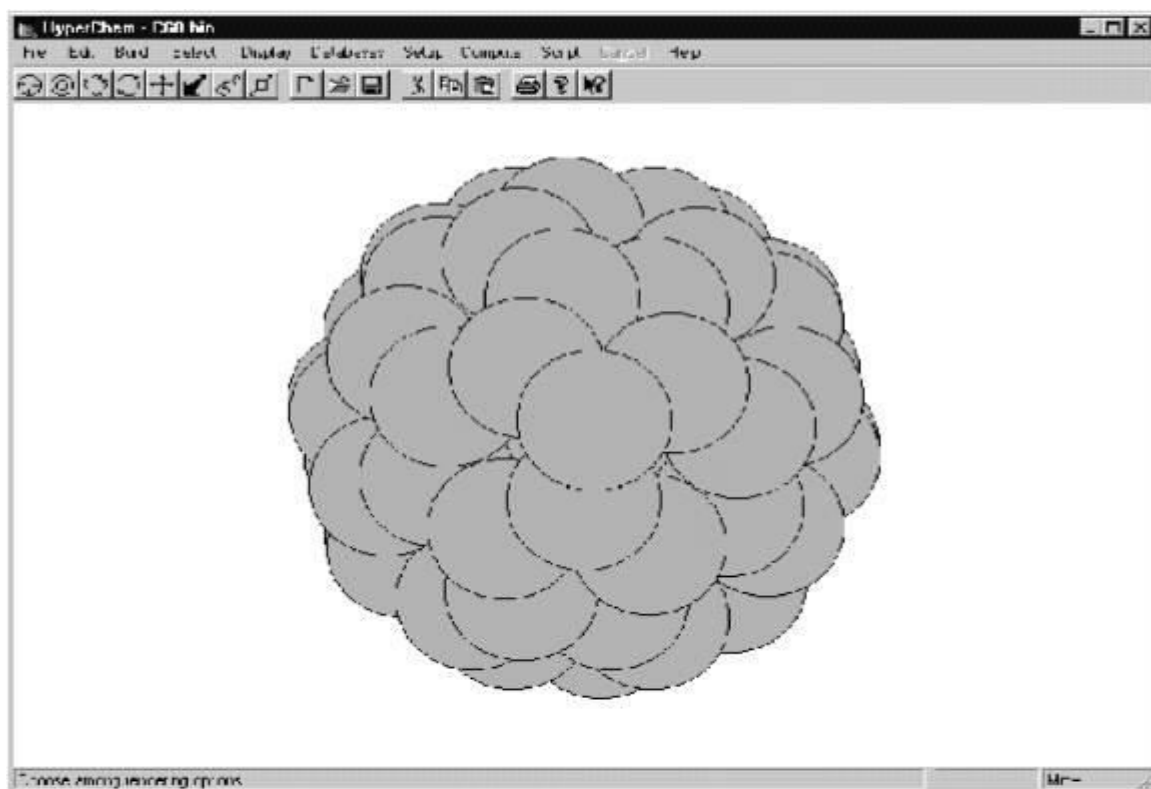
Молекулярдык системанын сүрөтүн өзгөртүү үчүн:

1. Display менюсунан Renderings ти тандоо керек.
2. Диалог менюсунан, мисалы, Bolls тандоо жана белгилөө.
3. Диалог терезесинин үстүнкү бөлүгүнөн Bolls деген жерин басып, параметрлер тизмесин ачабыз.



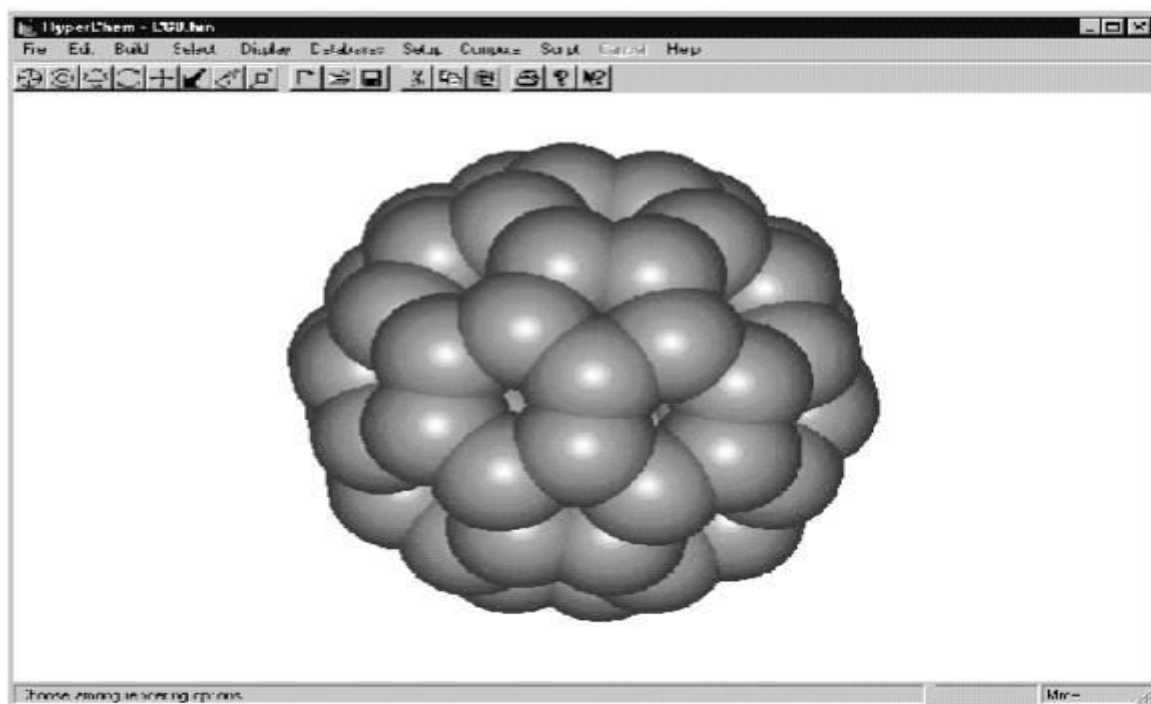
Сүрөт 3.2.3.1. Метод тандоо – Balls (Выбор метода отображения – Balls (шары))

4. Эгер Shading ден (□) белгисин өчүрүп салып, ОК баскычын бассак, анда жакындатылган бирок бат иштетүүчү көлөмдүү молекуланын сүрөтү алынат.



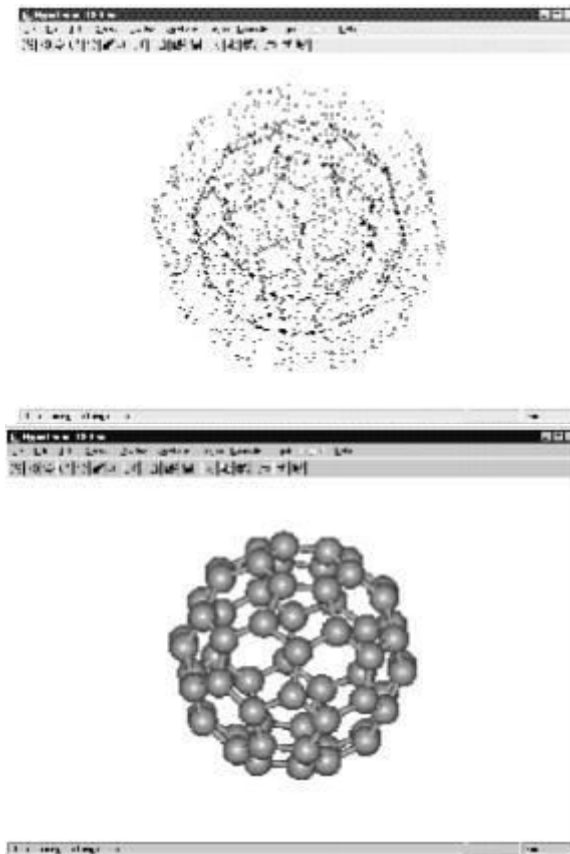
Сүрөт 3.2.3.2. Жакындатылган молекуланын көрүнүшү.

5. Эгер Shading ди тантап жана андан кийин ОК ди бассак мейкиндиктүү толтурган сүрөттү берет.



Сүрөт 3.2.3.3. Молекуланын мейкиндикте толукталган сүрөттөлүшү.

6. Эгерде диалог менюсунан Sticks & Dots (Стержин и точки) дегенди □□ тандасак, мындай көрүнүш бизге молекуланын формасын так көрсөтүп берет.



Сүрөт 3.2.3.4. Молекуланын көрүнүшүнүн сүрөттөлүшү.

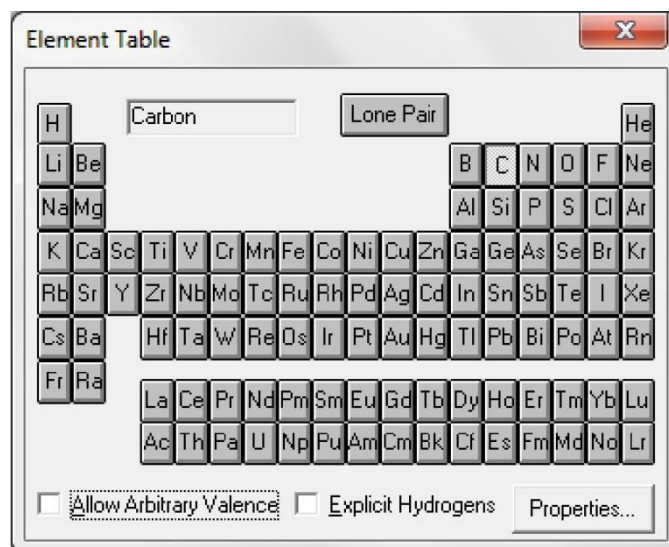
[F2] баскычын басуу бизге мурда тандалган молекуланын суротунун параметрлеринин калыбына келтирүү мүмкүнчүлүгүн берет. Бул дисплей менюсундагы Last Rendering тандоосуна эквиваленттүү.

Объекттерди түзүүнүн жана редактирлөөнүн неизги техникасы

NuVerChem ди ачкандан кийин терезесин толук экран боюнча чоңойтсо жакшы болот. Чоңураак иштөө жеринде молекулаларды түзүү абдан ыңгайлуу.

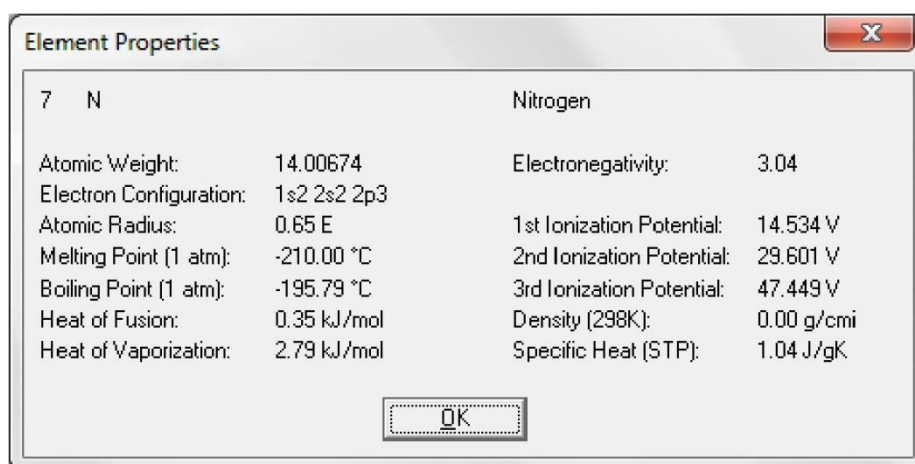
Өзүнчө атомдорду сүрөткө түшүрүү:

1. Build менюсунан Default element пунктун ачабыз. Анда Element Table деген диалог менюсү кармалат – бул Д.И.Менделеевдин элементтеринин периодикалык таблицасы.



Сүрөт 3.2.3.5. Элементтердин таблицасы.

2. Элементи тандоо үчүн чыккандын курсорун керектүү элементке алып келип чыккандын сол баскычы менен басабыз.
3. Эгер Properties... баскычын бассак, тандалган элементтик физикалык касиеттери жөнүндө маалыматты камтыган терезе ачылат.

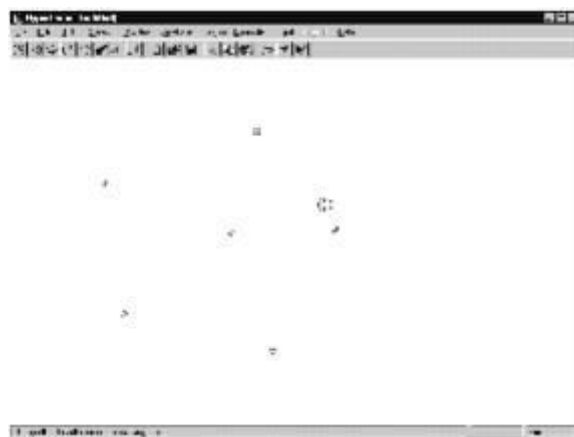


Сүрөт 3.2.3.6. Азот элементи жөнүндө маалымат.

ОК баскычын баскандан кийин терезе жоголуп кетет.

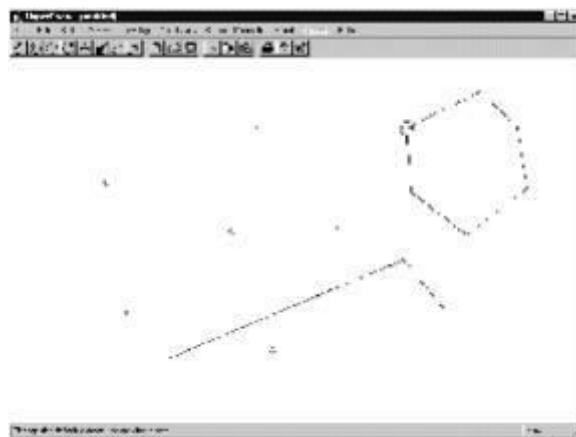
4. Ошондой эле Allow ions ☐ белгилесе же Explicit hydrogens белгилесе болот.
5. Элементи тандагандан кийин Element Table терезесин жабуу керек.
6. Курсорду иштөө жерине жылдырганда ☐ формасын алат.

7. Тандалган атомду чычкандын сол баскычына бир жолу басуу менен куруу талаасына жайгаштырабыз. Бир элементтин чектелбеген сандагы атомдорун бири – биринен ар кандай аралыкта жайгаштырса болот.
8. Элементи алмаштыруу үчүн Default Element терезесин үстүнөн чычкандын сол баскычын басуу менен кайра ачуу керек.



Сүрөт 3.2.3.7. Атомдордун жайгаштырылышы.

9. Эки атомду бири – бири менен бириктирүү үчүн чычкандын “мээлөөсүн” □ (Draw) атомго чычкандын сол баскычын (L – созуу) коёербестен сызыкты башка атомго чейин алып келебиз. Ушундай жол менен бардык мейкиндикте жайгаштырылган атомдорду бир молекулага химиялык байланыштын жардамы менен бириктирсе болот.
10. Молекуланы түзүү боюнча башка ыкма бар. Бир атомду түзүү талаасына жайгаштыргандан кийин чычкандын сол баскычын коёербестен, кийинки атом тургузулушу керек болгон жерге чейин сызык жүргүзөбүз жана чычкандын баскычын коёербестен бир жолу баскычты басабыз. Бул экинчи атомдун орду.



Сүрөт 3.2.3.8. Атомдордун байланышуусу.

11. Молекулаларды түзүүдө бүт баары эле жалпак структурага ээ эмес экендигин да белгилеп кетүү керек, ошондуктан бөлөк атомдорду мейкиндикте бири – бирине жараша кандайдыр бир бурчка жылдырууда,  Rotate out of plane деген көрсөткүчтү басуу менен молекуланы буруп караса болот.
12. Химиялык байланышты орток бөлүнүүчү (эки жолу, үч жолу, жарым жолу) кылыш үчүн, мээлөөнү бир байланышты көрсөткөн сызыктын жанына коюу керек жана бир жолу (эки жолу) чычкандын сол баскычына басуу керек.
13. Байланыштарды же атомдорду өчүрүү үчүн чычкандын оң баскычы колдонулат (R – басуу).

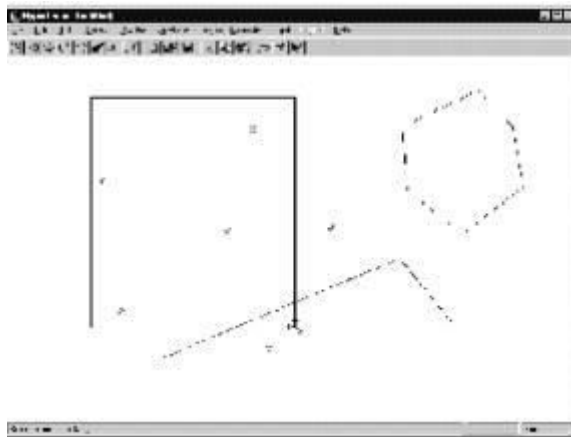
Атомдордун группасын тандоо

Атом топторуну тандоодо алар үч бурчтуу болушат

1. Select менюсунда Select Sphere деген белгиленген эмес болушу керек.
2. Иштөө жеринин бош жеринен чекит тандап алабыз, бир учурда чычкандын сол жана оң баскычтарын басуу менен андан белгилене турчу атомдорго түз сызык жүргүзөбүз. Мында тандалган жердин чек арасын көрсөтүүчү тик бурчтук тартылат.
3. Чычкандын баскычын коёбергенде тандоо жериндеги бардык атомдор белгиленген болуп калат.

Ушул эле терезеде атомдордун экинчи группасын белгилесе болот. Ал үчүн Select менюсунан Multiple Selections белгилөө керек. Андан кийин жогорудагыдай тик

бурчтукка башка атомдордун группасын киргизүү керек. Мында жаңы белгиленген атомдор мурунку атомдорго кошулат.



Сүрөт 3.2.3.9. Атомдордун бири-бири менен биригиши.

Бардык атомдорду белгилөө үчүн иштөө жеринин бош жерине курсорду жайгаштыруу керек жана бир жолу чычкандын сол баскычын басуу керек. Бардык белгиленгендерди токтотуу үчүн курсорду иштөө аймагынын бош жерине алып келип бир жолу басуу керек.

Атомдорду өчүрүү

Бир атомду же байланышты өчүрүү үчүн:

1. Инструменттер панелинен (Draw) инструменттик көрсөткүчүнүн үстүнөн бир долу басабыз.
2. Өчүрө турчу объектилерге курсорду алып келебиз жана R – басуу жүргүзөбүз. Атом же байланыш өчүп калат.

Бир канча атом же байланыш өчүрүү үчүн:

LR – чоюу аркылуу тикбурчтук ичиндеги мейкиндикке, өчүрүлө турган атомдорду же байланыштарды киргизебиз.

Edit менюсунан Clear ди тандайбыз, “тандаганыңыздарды өчүргүңүз келеби” деген суроо суралат, ооба дегенди басабыз.

Атомдордун жана молекулалардын танытма белгисин колдонуу

Эгерде молекула атомдук заряддардын ж.б танытма белгиси белгиси менен көрсөтүлсө, анда аларды төмөнкү жол менен өчүрсө болот:

4. Чычкандын баскычы менен L – басуу, Labels ачуу.
5. Атомдун танытма белгисинин тизмесинде автоматтык түрдө None деп белгиленип турат.

Түзүлүштөрдүн параметрлерин өлчөө

Бул бөлүк структуралык байланыштардын өлчөө техникасын сүрөттөйт. Ошондой эле бурчтарды өлчөө ыкмасы, атомдордун дисплейдик характеристикаларын өлчөө ыкмалары сүрөттөлөт, мисалы, заряддар жана мейкиндик координаталар.

Атомдордун мүнөздөмөлөрү

Атомдун негизги мүнөздөмөлөрү жөнүндө маалымат алуу үчүн аны белгилеп алыш керек. Абал сызыгында: тандалган молекулярдык механиканын күч талаасы үчүн атомдун номери, тиби жана заряды пайда болот. Ошондой эле ал ошол атомдун x y жана z координаталарын көрсөтөт. Build менюсунун пунктары Set Atom Type (атомдун тиби), Set Charge (заряд) жана Constrain Geometry (чектелген геометрия) керектүүсүн орнотууга мүмкүнчүлүк берет, алар программанын өзү аркылуу жарыяланбастан (по умолчанию) аныкталат эсептелинет.

Байланыштын узундугун өлчөө

Эгерде атомдуу эмес байланышты тандасак, анда ал жөнүндө маалымат абал сабына пайда болот. HyperChem атомдор арасы конкреттүү типтеги байланыштардын узундугу жана гибридизациясы жөнүндө китепканасы бар жана ал жарыяланбастан аныкталат. Китепканасында байланыштын узундугу жөнүндө маалымат жок болсо, анда HyperChem эки атомдун коваленттик радиустарынын орточо маанисин колдонот. Аралыктарын өлчөө үчүн курсордун формасын Select ке өзгөртүү керек жана ошол байланышты белгилейбиз. Абал сызыгында эки атомдун ортосундагы байланыштын узундугунун мааниси чыгат жана ал ангстрем ($\text{\AA}$) менен көрсөтүлөт. Ошол эле учурда Build менюсунда Constrain Bond Length пункту активдүү болуп калат, ал байланыштын узундугун, программанын моделдерин жарыяланбастан иштеп чыккандан айырмаланган, каалаган узундукта кылып өзгөтүүгө мүмкүнчүлүк берет.

Байланыштардын бурчтарын өлчөө

Эки байланыштын ортосундагы бурчту өлчөө үчүн ырааттуу түрдө байланыштары бири бири менен бурч пайда кылган биринчи, экинчи жана үчүнчү атомдорду белгилөө керек. Ошол эле учурда экинчи атом ошол бурчтун чокусунда болушу керек. Бурчтун чоңдугу абал сызыгында пайда болот.

Build менюсунда Constrain Bond Angle пункту активдүү болуп калат, ал берилген бурчтун чоңдугун өзгөртүүгө мүмкүнчүлүк берет.

3.2.4. HyperChem программасында эсептөөлөрдү жүргүзүү

Бүгүнкү күндө кванттык химиянын ыкмалары жана молекулярдык динамикалар электрондук тариздөө жана молекулярдык татаал системаларда атомдук түзүлүш, кристаллдык жана өткөөл ченемдердин кеңири сандык жайылтышынча ээ болушту. Бул технологиянын өнүгүшү менен тиешелүү математикалык камсыздоого байланыштуу. Меню Setup эсептин ыкмасына тапшырма берет. Бул ар түрдүү базистердеги молекулярдык механика, жарым эмпирикалык кванттык-химиялык ыкмалар жана Хартри-Фоктун эмпирикалык эмес ыкмасы болушу мүмкүн.

Меню Setup энергетикалык, геометриялык жана электрондук параметрлердин молекулярдык системада молекула-механикалык жана кванттык-химиялык эсептерди жүргүзүү үчүн опцияларды камтыйт. Андан кийин Setup менюсундагы керектүү опцияны тандап алгандан кийин, Compute менюсун колдонууга керектүү мүнөздөмөнү эсептөө жүргүзүү үчүн. Системанын кубаттуулук жана алардын геометриялык тең салмактуулук төрт моделдүү таризди колдонуу менен молекулярдык механика ыкмасы менен (MM+, AMBER, BIO+ жана OPLS), тогуз жарым эмпирикалык кванттык-химиялык ыкма менен (Хюккелдин кеңейтилген ыкмасы, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/1 жана ZINDO/S), же эмпирикалык эмес (ab initio) кванттык-химиялык ыкма менен ар түрдүү базистерде HyperChem программасы эсептөөнү ишке ашыра алат. Жумушту сактоо үчүн:

1. Файлдык менюдан Save (сактоо) дегенди тандайбыз.
2. Файлды сактоо үчүн диалогдук терезе пайда болот. Файл керектүү папкага сакталгандыгына көңүл буруу керек. File name ге каалаган ат берип сактайбыз (файлдын мазмунун же эсептөө параметрлерин тагыраак сүрөттөгөн ат болсо жакшы болот).
3. Save as type (файлдын түрү) HIN экендигин текшергиле.
4. L-чыкылдатуу OK ди тандагыла.
5. Диалогдук терезе жабылат жана сол жактын жогору бурчунда жабдыктар панелинин үстүндө файлдын аты пайда болот.

Эми түзүлүштү модификацияласак болот жана баардык өзгөрүүлөр ошол файлда сакталып калат (сактоо үчүн File менюсунан Save ди тандаса болот же жабдыктар панелинин тиешелүү белгисин колдонуу менен сактаса болот). Ар дайым эң акыркы сакталган вариантка келсе болот.

3.2.5. Кванттык-химиялык методу менен алынган алюминий оксидинин жана кремний оксидинин оптимизацияланган геометриялык түзүлүштөрү.

AlO_4 геометриялык параметрлери: байланыш узундуктары, валенттик бурчтары, байланыш тартиптери, заряддары берилди (жадыбал 3.2.5.1.).

Жадыбал 3.2.5.1. AlO_4 геометриялык параметрлери.

AlO_4							
Байланыш узундугу ($\text{\AA}$)		Байланыш тартиби		Эффективдүү заряд		Бурч ($^\circ$)	
Al^I-O^4	1.8019	Al^I-O^4	0.66638	Al^I	+0.665	$O^4Al^IO^2$	110.9390
Al^I-O^2	1.7543	Al^I-O^2	0.89908	O^4	-0.348	$O^4Al^IO^3$	114.1670
Al^I-O^3	1.7560	Al^I-O^3	0.04335	O^2	-0.450	$O^4Al^IO^5$	96.4411
Al^I-O^5	1.8023	Al^I-O^5	0.66606	O^3	-0.504	$O^2Al^IO^3$	109.6680
				O^5	-0.347	$O^2Al^IO^5$	110.9300
						$O^3Al^IO^5$	114.1540

SiO_4 геометриялык параметрлери байланыш узундуктары, валенттик бурчтары, байланыш тартиптери, заряддары берилди (жадыбал 3.2.5.2.).

Жадыбал 3.2.5.2. SiO_4 геометриялык параметрлери.

SiO_4							
Байланыш узундугу ($\text{\AA}$)		Байланыш тартиби		Эффективдүү заряд		Бурч ($^\circ$)	
Si^I-O^4	1.6850	Si^I-O^4	0.89055	Si^I	+1.204	$O^4Si^IO^2$	107.674
Si^I-O^2	1.6850	Si^I-O^2	0.89291	O^4	-0.509	$O^4Si^IO^3$	107.878
Si^I-O^3	1.6852	Si^I-O^3	0.89366	O^2	-0.507	$O^4Si^IO^5$	112.842
Si^I-O^5	1.6849	Si^I-O^5	0.89454	O^3	-0.507	$O^2Si^IO^3$	112.824
				O^5	-0.506	$O^2Si^IO^5$	107.893
						$O^3Si^IO^5$	107.823

AlO_6 геометриялык параметрлери: байланыш узундуктары, валенттик бурчтары, байланыш тартиптери, заряддары берилди (жадыбал 3.2.5.3.).

Жадыбал 3.2.5.3. AlO_6 геометриялык параметрлери.

AlO_6					
Байланыш узундугу ($\text{\AA}$)		Эффективдүү заряд		Бурч ($^\circ$)	
Al^I-O^2	1.7675	Al^I	+0.892	$O^6Al^I O^4$	108.084
Al^I-O^3	2.4628	O^2	-0.588	$O^6Al^I O^5$	61.430
Al^I-O^4	1.7511	O^3	-0.165	$O^2Al^I O^3$	81.616
Al^I-O^5	1.8246	O^4	-0.527	$O^3Al^I O^7$	35.449
Al^I-O^6	1.8281	O^5	-0.353	$O^7Al^I O^5$	80.353
Al^I-O^7	2.4816	O^6	-0.333		
		O^7	-0.203		

3.2.6. Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу атом аралык өз ара аракеттешүүлөрүнүн кванттык-химиялык анализдери

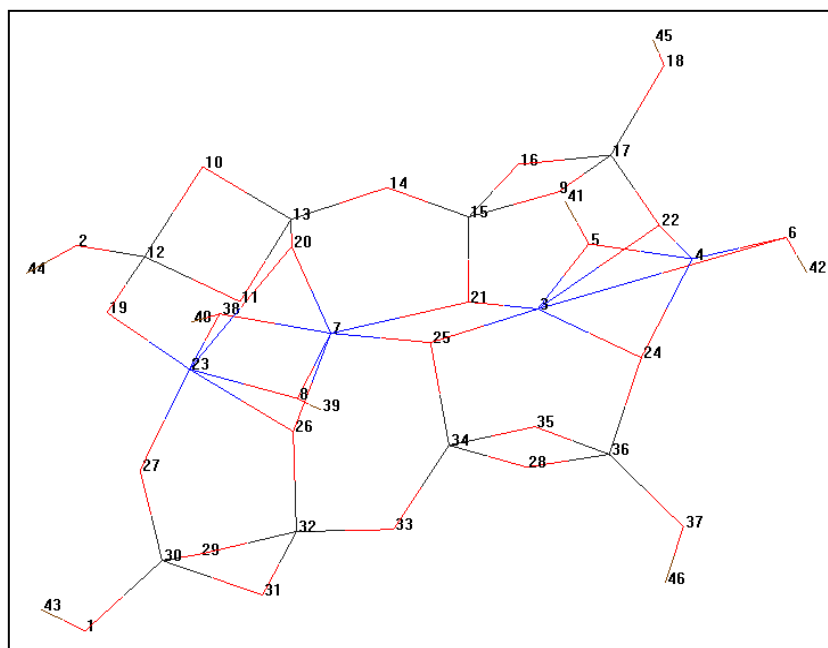
Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу геометриялык параметрлери: байланыш узундуктары, валенттик бурчтары, байланыш тартиптери, заряддары төмөнкү жадыбал 3.2.6.1.де берилди.

Жадыбал 3.2.6.1. Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу геометриялык параметрлери.

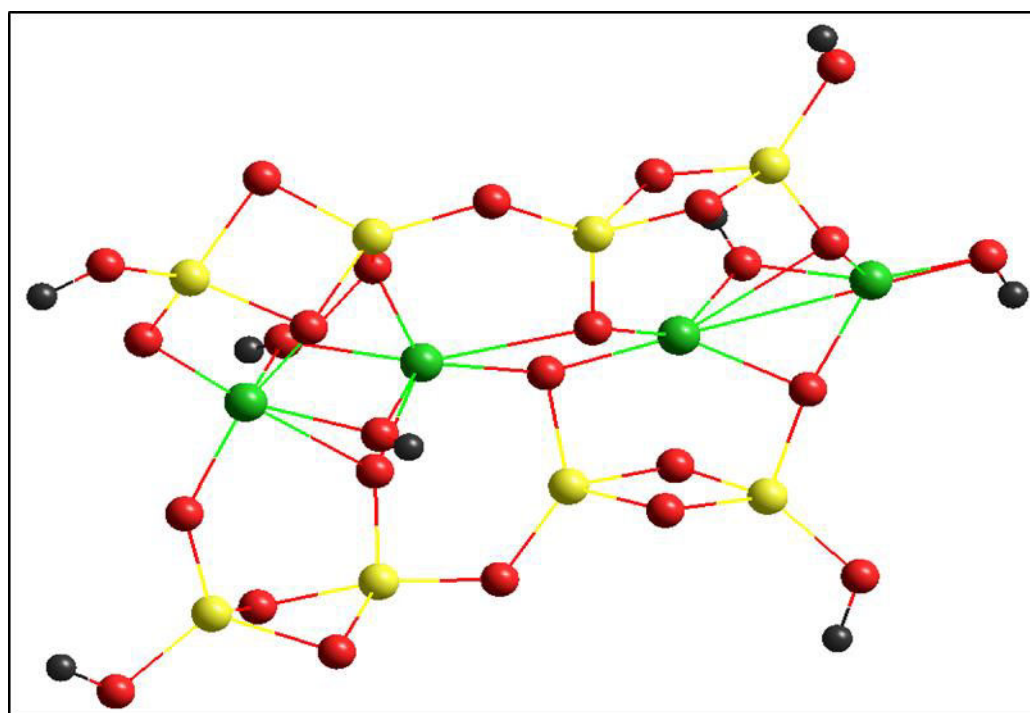
<i>SiAlO₇[AlO₄]</i>							
<i>Байланыш узундугу (Å)</i>		<i>Байланыш тартиби</i>		<i>Эффективдүү заряд</i>		<i>Бурч (°)</i>	
<i>Si²–O³</i>	<i>1.6631</i>	<i>Si²–O³</i>	<i>0.84653</i>	<i>Si²</i>	<i>+1.248</i>	<i>O³Si²O⁵</i>	<i>107.674</i>
<i>Si²–O⁵</i>	<i>1.6906</i>	<i>Si²–O⁵</i>	<i>0.87390</i>	<i>O³</i>	<i>-0.440</i>	<i>O³Si²O⁴</i>	<i>107.878</i>
<i>Si²–O⁴</i>	<i>1.6849</i>	<i>Si²–O⁴</i>	<i>0.90096</i>	<i>O⁵</i>	<i>-0.447</i>	<i>O³Si²O¹</i>	<i>112.842</i>
<i>Si²–O¹</i>	<i>1.6842</i>	<i>Si²–O¹</i>	<i>0.90011</i>	<i>O⁴</i>	<i>-0.506</i>	<i>O⁵Si²O⁴</i>	<i>112.824</i>
<i>Al⁶–O⁴</i>	<i>1.7868</i>	<i>Al⁶–O³</i>	<i>0.66399</i>	<i>O¹</i>	<i>-0.493</i>	<i>O⁵Si²O¹</i>	<i>107.893</i>
<i>Al⁶–O²</i>	<i>1.7746</i>	<i>Al⁶–O⁹</i>	<i>0.81669</i>	<i>Al⁶</i>	<i>+0.857</i>	<i>O⁴Si²O¹</i>	<i>107.823</i>
<i>Al⁶–O³</i>	<i>1.7619</i>	<i>Al⁶–O⁸</i>	<i>0.85813</i>	<i>O⁹</i>	<i>-0.476</i>	<i>Si²O³Al⁶</i>	<i>167.445</i>
<i>Al⁶–O⁵</i>	<i>1.7884</i>	<i>Al⁶–O⁷</i>	<i>0.72355</i>	<i>O⁸</i>	<i>-0.519</i>	<i>O³Al⁶O⁷</i>	<i>98.975</i>
				<i>O⁷</i>	<i>-0.411</i>	<i>O³Al⁶O⁸</i>	<i>112.317</i>
						<i>O³Al⁶O⁹</i>	<i>109.223</i>
						<i>O⁷Al⁶O⁸</i>	<i>115.369</i>
						<i>O⁷Al⁶O⁹</i>	<i>108.225</i>
						<i>O⁸Al⁶O⁹</i>	<i>111.905</i>

3.2.7. Кванттык-химиялык методу менен алынган монтмориллонит чопосунун оптимизацияланган геометриялык түзүлүшү.

Молекулалардын түзүлүшүндө химиялык байланыштын узундуктары, бурчтары, атомдордун эффективдүү заряддары, байланыш тартиптери жана энергиялары эсептелинди. Сүрөт 3.2.7.1.де Al=3, 4, 7, 23 жана Si=12, 13, 15, 17, 30, 32, 34, 36 сандары менен көрсөтүлгөн.



Сүрөт. 3.2.7.1. Монтмориллониттин оптимизацияланган геометриялык түзүлүшү (HyperChem программасында PM3 методу).



Сүрөт 3.2.7.2. Монтмориллониттин оптимизацияланган геометриялык түстүү түзүлүшү (HyperChem программасында PM3 методу).

Жадыбал 3.2.7.3. Монтмориллониттин байланыш узундуктары жана байланыш тартиптери.

<i>Байланыш</i>	<i>Байланыш узундугу</i>	<i>Байланыш тартиби</i>	<i>Байланыш</i>	<i>Байланыш узундугу</i>	<i>Байланыш тартиби</i>
$Si^{I2} - O^2$	1.6938	0.88141	$Si^{34} - O^{23}$	1.6897	0.85209
$Si^{I2} - O^{I1}$	1.7059	0.79245	$Si^{36} - O^{37}$	1.6821	0.91037
$Si^{I2} - O^{I0}$	1.7215	0.83820	$Si^{36} - O^{28}$	1.6848	0.85478
$Si^{I2} - O^{I9}$	1.6464	0.99509	$Si^{36} - O^{35}$	1.6871	0.83844
$Si^{I3} - O^{I4}$	1.6826	0.84200	$Si^{36} - O^{24}$	1.6779	0.81010
$Si^{I3} - O^{I0}$	1.7108	0.87086	$Al^{23} - O^{I9}$	1.7897	0.76841
$Si^{I3} - O^{I1}$	1.7287	0.78331	$Al^{23} - O^{20}$	2.5595	0.08459
$Si^{I3} - O^{20}$	1.6502	0.94104	$Al^{23} - O^8$	1.8421	0.59575
$Si^{I5} - O^{I4}$	1.6673	0.95509	$Al^{23} - O^{38}$	1.8552	0.58077
$Si^{I5} - O^{I6}$	1.7270	0.73463	$Al^{23} - O^{26}$	2.5763	0.07776
$Si^{I5} - O^9$	1.7219	0.80402	$Al^{23} - O^{27}$	1.8222	0.73093
$Si^{I5} - O^{21}$	1.6692	0.92390	$Al^7 - O^{20}$	1.7775	0.67904
$Si^{I7} - O^{I8}$	1.6872	0.88929	$Al^7 - O^8$	1.8784	0.46851
$Si^{I7} - O^9$	1.7001	0.87815	$Al^7 - O^{21}$	2.5102	0.12634
$Si^{I7} - O^{I6}$	1.7101	0.81756	$Al^7 - O^{25}$	1.8413	0.58004
$Si^{I7} - O^{22}$	1.6569	0.87767	$Al^7 - O^{38}$	1.8762	0.47310
$Si^{30} - O^I$	1.6942	0.88423	$Al^7 - O^{26}$	1.7786	0.59147
$Si^{30} - O^{31}$	1.7256	0.82457	$Al^4 - O^5$	1.8270	0.56874
$Si^{30} - O^{29}$	1.7314	0.81817	$Al^4 - O^{22}$	1.7466	0.83288
$Si^{30} - O^{27}$	1.6625	0.99341	$Al^4 - O^{24}$	1.8036	0.62484
$Si^{32} - O^{33}$	1.6951	0.81179	$Al^4 - O^6$	1.7482	0.92223
$Si^{32} - O^{29}$	1.7110	0.87050	$Al^3 - O^{21}$	1.8059	0.76788
$Si^{32} - O^{31}$	1.7095	0.87128	$Al^3 - O^{22}$	2.5626	0.10958
$Si^{32} - O^{26}$	1.6499	0.91068	$Al^3 - O^5$	1.8544	0.53120
$Si^{34} - O^{33}$	1.6804	0.95748	$Al^3 - O^6$	4.3941	0.01353
$Si^{34} - O^{35}$	1.7195	0.73795	$Al^3 - O^{24}$	1.8596	0.56070
$Si^{34} - O^{28}$	1.7349	0.71986	$Al^3 - O^{25}$	1.8838	0.56529

Жадыбал 3.2.7.4. Монтмориллониттеги атомдордун заряддары.

<i>Заряд</i>		<i>Заряд</i>	
Si^{12}	+1.157	O^{27}	-0.642
O^2	-0.493	Si^{32}	+1.142
O^{11}	-0.644	O^{33}	-0.567
O^{10}	-0.600	O^{26}	-0.677
O^{19}	-0.613	Si^{34}	+1.313
Si^{13}	+1.185	O^{35}	-0.675
O^{14}	-0.557	O^{28}	-0.662
O^{20}	-0.648	O^{25}	-0.493
Si^{15}	+1.234	Si^{36}	+1.279
O^{16}	-0.634	O^{37}	-0.497
O^9	-0.638	O^{24}	-0.537
O^{21}	-0.590	Al^{23}	+0.899
Si^{17}	+1.220	O^8	-0.446
O^{18}	-0.500	O^{38}	-0.428
O^{22}	-0.624	Al^7	+0.901
Si^{30}	+1.134	Al^3	+0.960
O^1	-0.486	O^5	-0.456
O^{31}	-0.609	O^6	-0.542
O^{29}	-0.604	Al^4	+0.922

Жадыбал 3.2.7.5. Монтмориллониттин атомдор арасы бурчтары.

Бурч	Эсептөө	Бурч	Эсептөө	Бурч	Эсептөө	Бурч	Эсептөө
$O^{19}Al^{23}O^{20}$	97.1479	$O^8Al^7O^{26}$	71.1926	$O^{14}Si^{13}O^{10}$	124.0651	$Si^{32}O^{26}Al^{23}$	124.3479
$O^{19}Al^{23}O^8$	137.6604	$O^{21}Al^7O^{25}$	56.0454	$O^{14}Si^{13}O^{11}$	123.7613	$Si^{32}O^{26}Al^7$	157.6970
$O^{19}Al^{23}O^{38}$	109.1905	$O^{21}Al^7O^{38}$	156.4990	$O^{14}Si^{13}O^{20}$	108.2450	$O^{33}Si^{34}O^{35}$	113.7826
$O^{19}Al^{23}O^{26}$	165.0892	$O^{21}Al^7O^{26}$	127.9609	$O^{10}Si^{13}O^{11}$	82.0095	$O^{33}Si^{34}O^{28}$	114.4243
$O^{19}Al^{23}O^{27}$	101.3719	$O^{25}Al^7O^{38}$	136.8760	$O^{10}Si^{13}O^{20}$	112.1105	$O^{33}Si^{34}O^{25}$	136.8042
$O^{20}Al^{23}O^8$	66.2438	$O^{25}Al^7O^{26}$	93.8605	$O^{11}Si^{13}O^{20}$	103.4412	$O^{35}Si^{34}O^{28}$	80.0496
$O^{20}Al^{23}O^{38}$	54.0703	$O^{21}Al^3O^{22}$	98.1267	$Si^{13}O^{20}Al^{23}$	97.6988	$O^{35}Si^{34}O^{25}$	94.5224
$O^{20}Al^{23}O^{26}$	80.3178	$O^{21}Al^3O^5$	142.1428	$Si^{13}O^{20}Al^7$	135.1486	$O^{28}Si^{34}O^{25}$	101.6563
$O^{20}Al^{23}O^{27}$	160.3561	$O^{21}Al^3O^6$	142.8268	$O^{14}Si^{15}O^{16}$	129.2340	$Si^{34}O^{25}Al^7$	108.6002
$O^8Al^{23}O^{38}$	92.4264	$O^{21}Al^3O^{24}$	133.8439	$O^{14}Si^{15}O^9$	108.5439	$Si^{34}O^{25}Al^3$	99.3361
$O^8Al^{23}O^{26}$	54.6389	$O^{21}Al^3O^{25}$	70.4078	$O^{14}Si^{15}O^{21}$	112.9567	$Al^{23}O^{20}Al^7$	70.8432
$O^8Al^{23}O^{27}$	103.0848	$O^{22}Al^3O^5$	68.7720	$O^{16}Si^{15}O^9$	83.3333	$Al^{23}O^8Al^7$	88.3691
$O^{38}Al^{23}O^{26}$	57.4363	$O^{22}Al^3O^{24}$	65.5435	$O^{16}Si^{15}O^{21}$	87.6528	$Al^{23}O^{38}Al^7$	88.0455
$O^{38}Al^{23}O^{27}$	112.6262	$O^{22}Al^3O^{25}$	162.6523	$O^9Si^{15}O^{21}$	118.9184	$Al^{23}O^{26}Al^7$	70.3853
$O^{26}Al^{23}O^{27}$	80.1024	$O^5Al^3O^6$	39.4725	$Si^{15}O^{21}Al^7$	114.0436	$Al^7O^{21}Al^3$	101.9652
$O^{22}Al^4O^5$	91.5799	$O^5Al^3O^{24}$	74.5668	$Si^{15}O^{21}Al^3$	120.4543	$Al^7O^{26}Al^3$	130.4737
$O^{22}Al^4O^6$	123.0822	$O^5Al^3O^{25}$	111.9737	$O^1Si^{30}O^{31}$	117.1971	$Al^3O^{22}Al^4$	74.3102
$O^{22}Al^4O^{24}$	87.9582	$O^6Al^3O^{24}$	40.8568	$O^1Si^{30}O^{29}$	115.8354	$Al^3O^5Al^4$	93.5554
$O^5Al^4O^6$	126.2050	$O^6Al^3O^{25}$	145.5402	$O^1Si^{30}O^{27}$	110.1574	$Al^3O^6Al^4$	9.1563
$O^5Al^4O^{24}$	76.5810	$O^{24}Al^3O^{25}$	131.7919	$O^{31}Si^{30}O^{29}$	79.3595	$Al^3O^{24}Al^4$	94.1512
$O^6Al^4O^{24}$	130.5121	$O^2Si^{12}O^{11}$	124.0802	$O^{31}Si^{30}O^{27}$	114.6766	$Si^{12}O^{11}Si^{13}$	94.1357
$O^{20}Al^7O^8$	85.3399	$O^2Si^{12}O^{10}$	110.2081	$O^{29}Si^{30}O^{27}$	116.8599	$Si^{12}O^{10}Si^{13}$	94.2207
$O^{20}Al^7O^{21}$	86.7551	$O^2Si^{12}O^{19}$	112.9517	$Si^{30}O^{27}Al^{23}$	138.5464	$Si^{13}O^{14}Si^{15}$	120.6627
$O^{20}Al^7O^{25}$	128.5091	$O^{11}Si^{12}O^{10}$	82.3615	$O^{33}Si^{32}O^{29}$	136.4262	$Si^{15}O^{16}Si^{17}$	95.1467
$O^{20}Al^7O^{38}$	70.1967	$O^{11}Si^{12}O^{19}$	99.9821	$O^{33}Si^{32}O^{31}$	135.9513	$Si^{15}O^9Si^{17}$	95.6990
$O^{20}Al^7O^{26}$	137.3020	$O^{10}Si^{12}O^{19}$	124.7343	$O^{33}Si^{32}O^{26}$	96.2925	$Si^{30}O^{31}Si^{32}$	90.8868
$O^8Al^7O^{21}$	92.0395	$Si^{12}O^{19}Al^{23}$	109.5407	$O^{29}Si^{32}O^{31}$	80.3554	$Si^{32}O^{33}Si^{34}$	113.5504
$O^8Al^7O^{25}$	125.5158	$Si^{34}O^{28}Si^{36}$	98.4017	$O^{29}Si^{32}O^{26}$	105.4031	$Si^{34}O^{35}Si^{36}$	98.9198
$O^8Al^7O^{38}$	90.6165			$O^{31}Si^{32}O^{26}$	111.4051		

4. БӨЛҮМ.

АЛЫНГАН ЖЫЙЫНТЫКТАРДЫ ТАЛКУУЛОО

4. Жыйынтыктар

Бешкент жатагынын чопосунда кальций жана магний оксиддери, ошондой эле кальций жана магний карбонаттары башка элементтердин оксиддери менен карбонаттарына салыштырмалуу көп санда кармалгандыгы аныкталды. Кремний оксидинин алюминий оксидине болгон катышы 5:1 болгондуктан, Бешкент жатагынын чопосун бентонит тобуна (смектиддерге) киргизүүгө болот деген жыйынтык чыгарылды.

Чопонун катион алмашуу жөндөмдүүлүгүн аныктоосу ANSI/ASTM C837-76 стандартына ылайык жасалды. Бул ыкмада белгилүү pH жана белгилүү концентрациядагы метилен көктүн чопо тарабынан адсорбцияланышы.

Изилденүүчү чопонун катион алмашуу жөндөмдүүлүгү 80 м-экв/100 г чопого барабар болду.

Нымдуулукту аныктоодо ГОСТ 3594. 15-93 эл аралык стандарты колдонулду. Изилденүүчү чопонун нымдуулугу 4,5 % ды түздү.

Күйгүзүүдөгү масса жоготууну аныктоодо ГОСТ 3594. 11-93 стандарты колдонулду. Изилденүүчү чопонун күйгүзүүдөгү масса жоготуусу 5,19 %ды түздү.

Бешкент жатагынын чопосунун гранулометриялык курамы аныкталды. Сүрөт 2.2.1.1 де чопонун көлөмү <0,05мм, <0,01мм, <0,005мм, <0,001мм болгон бөлүкчөлөрдүн пайыздык кармалышы көрсөтүлгөн. Жыйынтыгында <0,005мм болгон бөлүкчөлөр 68% түздү.

Бешкент жатагынын бентонит чопосунун адсорбция жөндөмдүүлүгү аныкталды. Ленгмюр жана Фрейндлих адсорбция изотермаларынын графиктери алынып, Ленгмюр адсорбция изотермасы оптималдуу болуп чыкты. Оптималдуу температура 303К тандалды. Ленгмюр жана Фрейндлих адсорбция изотермаларынын графиктери Сүрөт 3.2.2.4. жана 3.2.2.5. көрүнүп тургандай эң жогору сыйымдуулукка ээ 308К де болду. Андан кийин катары менен 303К жана

293K. 303K оптималдуу деп эсептелгендин себеби, адсорбция сыйымдуулугу 308K ге салыштырмалуу айырмачылыгы өтө чоң болбогондуктан жана 308K энергиянын көп коротулушунан 303K оптималдуу деп аныкталды. 303K деги адсорбция сыйымдуулуктары сүрөт 3.2.2.6. көрсөтүлдү. Чопонун адсорбция активдүүлүгү чопо минералдарынын химиялык курмынан жана түзүлүшүнөн көз каранды болгону тастыкталды.

Тетраэдр түрүндөгү кремний оксидинин Si-O атомдор арасындагы байланыш узундугу $1.57 \text{ \AA}$ ден $1.72 \text{ \AA}$ ге чейин болот, ал эми орточо байланыш узундугу $1.62 \text{ \AA}$ барабар. Кремний оксидинин орточо байланыш узундугу $1.6850 \text{ \AA}$ барабар болуп чыкты (жадыбал 3.2.5.2.). Алюминий оксид менен кремний оксидин кошкондогу орточо байланыш узундугу $1.6807 \text{ \AA}$ барабар (жадыбал 3.2.6.1.). Ал эми монтмориллониттин орточо байланыш узундугу $1.6942 \text{ \AA}$ (жадыбал 3.2.7.3.). Демек, эсептөөлөрдүн жыйынтыктары боюнча аныкталган орточо байланыш узундуктары адабияттык маалыматка дал келет.

5. БӨЛҮМ.

КОРУТУНДУЛАР

5. Коротундулар

1. Бешкент жатагынынын бентонит чопосунун физика-химиялык касиеттери (катион алмашуу жөндөмдүүлүгү, гранулометриялык, химиялык курамдары ж.б.) жана кремний оксидинин алюминий оксидине болгон катышы 5:1 туура келери аныкталды. Аткарылган изилдөөлөрдүн жыйынтыгында Бешкент жатагынын чопосу монтмориллонит чополордун өкүлү болуп эсептелери далилденди.

2. Бентонит чопосунун метил көккө карата адсорбциясы изилденди. Тең салмактуу адсорбциянын жыйынтыктары эки белгилүү изотермалардын жардамы менен алынды жана алар Ленгмюр жана Фрейндлих изотермалары экендиги көрсөтүлдү. Эң жакын изотерманы аныктоо үчүн сызыктуу эмес ыкмасы колдонулду. Бул учурда Ленгмюр изотермасы Фрейндлих изотермасына караганда эң жакын изотерма болуп чыкты. Оптималдуу температура болуп 303K эсептелинди. Адсорбция сыйымдуулугу 308K ге караганда төмөн болгондугуна карабастан 303K тандалды. Себеби, 303K ге караганда, 308K де энергия көп талап кылынат. Адсорбциялык касиеттердин жыйынтыгы боюнча Бешкент жатагынын бентонит чопосу метилен көк боёгун адсорбциялоого жогорку жөндөмдүүлүгүн көрсөттү.

3. Кванттык-химиялык методу менен SiO_4 , Al_2O_3 , $\text{SiO}_2\text{-AlO}_4$ системасын жана монтмориллониттин оптимизацияланган геометриялык түзүлүшү эсептелди. Байланыш узундуктар, эффективдүү заряддар, байланыш тартиптер, бурчтар жана энергиялар аныкталды. Бешкент жатагынын бентониттин жүргүзүлгөн кванттык-химиялык эсептөөсү табигый бентонитти адекваттуу түрдө сүрөттөп турат.

АДАБИЯТТАР

- [1]. Мосейко Т.И., Кулакова Н.В., Алексеева Н.Г., Минеральные ресурсы неметаллических полезных ископаемых Кыргызской Республики, Бишкек, 1996.
- [2]. Звягин Б. Б., Пинскер З. Г.— ДАН СССР, новая серия, 1949.
- [3]. Брегг У. Л. Кристаллическое состояние, 1. ОНТИ, М.—Л., 1938.
- [4]. Madencilik sektörü, TMMOB Maden Mühendisleri Odası, 2002.
- [5]. Özkan, O.T., ve Erkalfa, H., Türkiye’de’ki Ticari Bentonit Killerinin Özellikleri ve Kullanılış Alanlarının Tespiti, 1977.
- [6]. Penner, D. and Lagaly, G., *Clays and Clay Minerals*, 2000.
- [7]. Worral, W.E., 1986. *Clays and Ceramic Raw Materials*, Elsevier, London.
- [8]. Marshall C E.-Z. Krist., 1935.
- [9]. Gruner J. N.—Z. Krist., 1932.
- [10]. Франк - Каменецкий В. А. Природа структурных примесей и включений в минералах. Изд. Ленинградского ун-та, Л., 1964.
- [11]. Куковский Е. Г. Особенности строения и физико-химические свойства глинистых минералов. «Наукова думка», 1966.
- [12]. Могоу Э. Д.— В кн.: Физика минералов. «Мир», М., 1964.
- [13]. Radoslovich E. W.— International Clay Conference 1, Pergamon Press, Oxford — London, N. Y.— Paris, 1963.
- [14]. Уокер Г. Ф.— В кн.: Рентгеновские методы определения минералов глин. ИЛ, М., 1955.
- [15]. Зульфугаров З.Г. Исследование физико-химических свойств и отбеливающие способности глин месторождений гумбрина, Баку, 1967.
- [16]. Hendricks S. B.— J. Geol., 1942.
- [17]. Brindley G. W.— The X-ray Identification of Crystal Structure of Clay Minerals. Ed. by G. Brown. London 1961.
- [18]. Экспериментальные исследования по разложению минералов органическими кислотами. Сборник. М., «Наука» 1968.
- [19]. Асратян Г.С. Изучение сорбционных свойств некоторых глин Армении для очистки нефтепродуктов. Автореферат дисс на соискание ученой степени к.х.н., Ереван, 1965.

- [20]. Eckart O. Ang. Chem., 1934.
- [21]. Романютин, .А\ А. Целебная глина / А. А. Романютин, Р. Р; Назаревич У/ Медицина Украины. — 1995.
- [22]. Звягин Б. Б. Электронография и структурная кристаллография глинистых минералов. «Наука», М., 1964.
- [23]. Куковский Е. Г., Островская А. Б., Джус Е. В.— Рентгенография минерального сырья, 1964.
- [24]. Kocakuşak, S., Akçay, K., Köroğlu, H.J., Yüzer, H., Ayok, T., Savaşçı, Ö.T., Tolun, R., Bentonitlerin Silanlama Yöntemi ile Tikotropilerinin Araştırılması, İzmir, 1997.
- [25]. İpekoğlu, B., Kurşun, İ., Bilge, Y., Barut, A., 1997: Türkiye Bentonit Potansiyeline Genel Bir Bakış, 2. *Endüstriyel Hammaddeler Sempozyumu*, İzmir, Türkiye. Gruner J. W.—Am. Min., 1934.
- [26]. Yaylalı, G., Değirmenci, S., Şirin, B., Akarlar, N., Türkiye’de Döküm Bentonitlerinin 2000’lerde iyileştirilmesi, *T.M.M.O.B. Metalurji Mühendisleri Odası Metalurji*, Hydraulic performance of polymer modified Jessica A. Schenning *University of South Florida*, 2001.
- [27]. Hydraulic performance of polymer modified Jessica A. Schenning *University of South Florida*.
- [28]. BENTONITE PROCESSING *University of Zagreb, Faculty of Mining, Geology, and Petroleum Engineering*.
- [29]. Alexander, J., Bentonite, *Industrial and Engineering Chemistry*, 1996.
- [30]. Бондарев А.В., диссертация на соискание ученой степени кандидата фармацевтических наук, Разработка состава и технологии гранулированной лекарственной формы с адсорбционным действием на основе монтмориллонитовой глины, Белгород, 2015.
- [31]. Дегтярь Н., диссертация кандидата технических наук, Разработка технологии деметаллизации вин на основе использования природных модифицированных сорбентов, Кишинев, 2012.
- [32]. Семененко М.П., диссертация на соискание ученой степени доктора ветеринарных наук, Фармакология и применение бентонитов в ветеринарии, Краснодар, 2008.

ӨМҮР БАЯН

ЖЕКЕ МААЛЫМАТ

Аты жөнү	Илияз Абдилла уулу
Улуту	Кыргыз
Туулган жылы	27.03.1994
Телефон	+996 700502449
E-mail	iliaz.aidarov.ij@gmail.com

БИЛИМИ

Даража	Окуу жайы	Бүтүргөн жылы
Магистратура	Кыргыз-Түрк «Манас» университети, Табигый илимдер институту, Химия инженерлиги багыты	2018
Бакалавриат	Кыргыз-Түрк «Манас» университети, Инженердик факультети Химия инженерлиги бөлүмү	2016
Орто мектеп	Молдо Нияз атындагы №37 гимназия, Кызыл-Булак айылы, Баткен обл.	2011

ЧЕТ ТИЛ

Орусча
Түркчө
Англисче