Статья поступила в редакцию: 08.09.2026
Статья принята к публикации: 14.09.2026
Статья опубликована: 28.10.2026

УДК 678.544.32:631.67

Технологическое и квантово-химическое обоснование перспективной Na-КМЦ-композиции с виниловыми эфирами фруктовых кислот

Махмудова Махпурахон Хабибулло кизи
соискатель
Республика Узбекистан, г. Наманган
Солиев Махаммаджон Исматуллаевич
PhD, доц., проф.
кафедры химии, Наманганский государственный технический университет
Республика Узбекистан, г. Наманган
Охундадаев Абдугани Комилжон угли
PhD, заведующий кафедрой
химической инженерии, Наманганский государственный технический университет
Республика Узбекистан, г. Наманган
Сайпиев Турсуннулот Собитович
канд. техн. наук, доц.
кафедры химии, Наманганский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Наманган

Technological and quantum-chemical rationale for a prospective Na-CMC composition with vinyl esters of fruit acids

Makhmudova Makhpurakhon Khabibullo kizi
RResearch degree applicant,
Uzbekistan, Namangan
Soliev Mahammadjon Ismatullaevich
PhD, Associate Professor, Professor
at the Department of Chemistry,
Namangan State Technical University,
Uzbekistan, Namangan
Okhundadaev Abdugani Komiljon ugli
PhD,
Head of the Department of Chemical Engineering,
Namangan State Technical University,
Uzbekistan, Namangan
Saypiev Tursunpulot Sobitovich
candidate of Technical Sciences, Associate Professor
at the Department of Chemistry
Namangan State University
Uzbekistan, Namangan

Библиографическое описание: Технологическое и квантово-химическое обоснование перспективной Na-КМЦ-композиции с виниловыми эфирами фруктовых кислот // Universum: технические науки : электрон. научн. журн. Махмудова М.Х. кизи [и др.]. 2026. 10(151). URL: https://7universum.com/ru/tech/archive/item/23403

Аннотация

Цель работы — обосновать перспективную композицию из натрий-карбоксиметилцеллюлозы (Na-КМЦ) и виниловых эфиров фруктовых кислот на основе экспериментальных и квантово-химических данных. Na-КМЦ получали из равных масс стеблей пшеницы, риса и арахиса водно-щелочной обработкой, пероксидным отбеливанием, мерсеризацией и реакцией с натриймонохлорацетатом. Степень замещения составила 0,85, степень полимеризации — 490, влажность — 9 %, pH 1,5 %-ного раствора — 9,1; содержание основного вещества — 49,9 %, растворимость — 98,6 % для сухого технического продукта. Для модельных моновиниловых эфиров яблочной, винной и лимонной кислот выполнен скрининговый расчёт B3LYP/STO-3G на MMFF94s-конформерах. Рассчитанные значения топологической полярной поверхности составили 83,83–121,13 Å², дипольного момента — 0,79–2,51 D, а HOMO–LUMO-разрыва — 5,68–6,02 эВ. Дескрипторы предсказывают усиление гидратации в ряду малат < тартрат < цитрат, тогда как различия электронной доступности умеренны. Для ди- и тривинильных модельных фракций получены разрывы 5,81 и 5,60 эВ, что поддерживает их рассмотрение как потенциальных узлов сетки; это не заменяет кинетического эксперимента. Предложено раздельное получение очищенной Na-КМЦ и мономера с последующим контролируе-мым совмещением. Функциональные свойства продукта, почвенная эффективность, биоразлагаемость и себестоимость требуют экспериментальной проверки.

Abstract

This study provides experimental and quantum-chemical support for a prospective composition of sodium carboxymethylcellulose (Na-CMC) and fruit-acid vinyl esters. Na-CMC was produced from equal masses of wheat, rice, and peanut stalks by aqueous alkaline treatment, peroxide bleaching, mercerization, and reaction with sodium monochloroacetate. The degree of substitution was 0.85, the degree of polymerization 490, moisture 9 %, and pH 9.1 for a 1.5 wt% solution; the dry technical product contained 49.9 % main substance and had 98.6 % water solubility. Screening calculations for model monovinyl esters of malic, tartaric, and citric acids used B3LYP/STO-3G single points on MMFF94s conformers. Topological polar surface areas were 83.83–121.13 Å², dipole moments 0.79–2.51 D, and HOMO–LUMO gaps 5.68–6.02 eV. The descriptors predict increasing hydration contribution from malate to tartrate to citrate, while electronic-accessibility differences are moderate. Di- and trivinyl model fractions gave gaps of 5.81 and 5.60 eV, supporting their consideration as potential network nodes; this does not replace kinetic experiments. Separate preparation of purified Na-CMC and the monomer with controlled mixing is proposed. Product functionality, soil performance, biodegradability, and cost remain to be tested.

Ключевые слова: натрий-карбоксиметилцеллюлоза, растительные остатки, виниловые эфиры фруктовых кислот, полимерная матрица, влагоудержание, технологическая схема.

Keywords: sodium carboxymethylcellulose, plant residues, fruit-acid vinyl esters, polymer matrix, water retention, process design.

Введение

Na-КМЦ из аграрных остатков рассматривается как альтернатива хлопковому продукту [2, 4–7]. Целлюлозные гидрогели изучают для водосбережения [1, 3, 10], а виниловые эфиры яблочной, винной и лимонной кислот [9] — потенциальные компоненты новых композиций. Цель работы — оценить смешанную Na-КМЦ как матрицу и определить контрольные стадии будущей технологии.

Материалы и методы

Равные массы стеблей пшеницы, риса и арахиса измельчали до 10–15 мм; водная обработка — 2 ч, гидромодуль 1:20; варка — 2 %-ный NaOH, 2 ч. Выход сухой массы до отбеливания — 45 %. Отбеливание: 5–6 %-ный H_2O_2, слабощелочная среда, 80 °C, 40 мин; затем промывка до нейтральной реакции.

Высушенную целлюлозу (1 г) мерсеризовали в 20 мл 22 %-ного NaOH: 20–30 °C, 60 мин. После отжима до трёхкратной исходной массы вводили 1,9 моль натриймонохлорацетата на моль ангидроглюкозных звеньев. Механохимическая обработка: 60 мин, начальная температура 20–22 °C, конечная 33 °C; созревание: 70–80 °C, 30 мин; сушка: 95–100 °C. Степень замещения определяли через медную форму и иодометрическое титрование; структуру исследовали ИК-спектроскопией и рентгенографией. Повторность и погрешности исходной серии не указаны; статистические различия не оценивались.

Результаты и обсуждение

Квантово-химический скрининг модельных виниловых эфиров

Молекулярные структуры задавали SMILES; для каждой структуры выбирали MMFF94s-конформер (RDKit ETKDGv3), затем выполняли расчёт одной точки B3LYP/STO-3G в PySCF 2.14. Определяли топологическую полярную поверхность (TPSA), число доноров и акцепторов водородной связи, дипольный момент и энергии граничных орбиталей. Такой уровень является скрининговым: он позволяет сравнить молекулярный вклад компонентов, но не даёт количественной константы сополимеризации или готового свойства гра-нулы. Результаты для модельных моновиниловых эфиров приведены в табл. 1.

Таблица 1. Расчётные дескрипторы модельных моновиниловых эфиров

Модель	TPSA, Å²	HOMO–LUMO, эВ	μ, D
Малат	83,83	6,01	1,15
Тартрат	104,06	5,68	0,79
Цитрат	121,13	6,02	2,51

Расчёт: B3LYP/STO-3G, одна точка на MMFF94s-конформере; значения являются сравнительным скринингом.

TPSA возрастает от 83,83 Å² для малата до 121,13 Å² для цитрата; число доноров/акцепторов изменяется от 2/4 до 3/5. Поэтому расчёт предсказывает повышение вклада полярных групп и гидратации в ряду малат < тартрат < цитрат. Наименьший HOMO–LUMO-

разрыв получен для тартрата (5,68 эВ), а для малата и цитрата — 6,01 и 6,02 эВ; различие следует трактовать как относительный электронный дескриптор, а не как прогноз выхода. Дипольные моменты чувствительны к конформации и использованы только вместе с TPSA.

Для проверки сеткообразующей гипотезы дополнительно рассмотрены ди-винилтартрат и три-винилцитрат: рассчитанные разрывы составили 5,81 и 5,60 эВ соответственно. Наличие двух или трёх винильных групп делает эти модели потенциальными узлами, но сам расчёт не доказывает полимеризацию. Экспериментально должны быть установлены гель-фракция, конверсия двойных связей, остаточный мономер и удержание Na-КМЦ.

Экспериментальные показатели Na-КМЦ и технологическая схема

Получено 2,87 г беловатого технического порошка: влажность 9 %, степень замещения 0,85, степень полимеризации 490, pH 1,5 %-ного раствора 9,1. Основное вещество — 49,9 %, растворимость — 98,6 % в пересчёте на сухой технический продукт. Масса порошка не равна выходу чистого полимера; растворимость включает вклад примесей. Их состав требует уточнения: считать всю сопутствующую фракцию солями нельзя.

ИК-полосы 1595,9–1599,4, 1410,6 и 1058,7 $см^{-1}$ согласуются с карбоксилатными и эфирными фрагментами [8]. Изменения дифрактограммы без разделения фаз и расчёта индекса кристалличности не доказывают аморфизацию. Эти данные обосновывают испытание матрицы, но не подтверждают гидрогель.

Технология предусматривает очистку Na-КМЦ и отдельное получение мономера, затем совмещение потоков, сеткообразование, промывку, обезвоживание, сушку и классификацию гранул. Контролируют влажность и остаточный лигнин целлюлозы; сухой остаток, pH, степень замещения и вязкость Na-КМЦ; винильную функциональность, кислотное число, воду и растворитель мономера. Расчётные дескрипторы подсказывают, что цитратная фракция даст больший полярный вклад, а многофункциональные фракции — больше потенциальных узлов. При pH 9,1 обязательна проверка совместимости компонентов. Ацетиленовый модуль [9] требует самостоятельного регламента безопасности.

Радикальное формирование привитой или полувзаимопроникающей сетки остаётся гипотезой. Моновинильный компонент сам по себе не обеспечивает сшивание, а Na-КМЦ не содержит винильных групп. Нужны контроль многофункциональности, экстракция, определение гель-фракции, остаточного мономера и удержания Na-КМЦ. Исчезновение винильных сигналов не доказывает ковалентную прививку.

Набухание оценивают как $Q_t = (m_t - m_0)/m_0$, г/г: m_0 — масса сухого промытого геля, m_t — после набухания и удаления поверхностной воды по единому протоколу. Планируются солевые среды, повторные циклы, гранулометрия, влажность почвы, электропроводность вытяжки и прорастание относительно контроля [1, 3, 9]. Контролируемое действие означает предполагаемую регуляцию водопоглощения и влагоотдачи; она ещё не исследована.

Резервы удешевления — аграрное сырьё, водная переработка и исключение промежуточной сушки с пересчётом NaOH по влажности. Очистка должна ограничивать потери растворимой Na-КМЦ; простая водная промывка не гарантирует обессоливания. Эффект требует баланса реагентов, воды, растворителей и энергии.

Заключение

Полученная Na-КМЦ со степенью замещения 0,85 и степенью полимеризации 490 пригодна как кандидатная водная матрица после очистки. Квантово-химический скрининг трёх моновиниловых эфиров предсказывает рост полярного вклада в ряду малат < тартрат < цитрат; модели ди- и триэфиров указывают на потенциальную многофункциональность. Раздельная подготовка компонентов и контролируемое совмещение образуют проверяемую технологическую гипотезу.

Список литературы

1. Abg Ahmad D.F.B. et al. Eco-friendly cellulose hydrogels as controlled release fertilizer for enhanced growth and yield of upland rice // Sci. Rep. – 2023. – T. 13. – Art. 20453. – DOI: 10.1038/s41598-023-47922-y.
2. Adinugraha M.P., Marseno D.W. Haryadi. Synthesis and characterization of sodium carboxymethylcellulose from cavendish banana pseudo stem (Musa cavendishii Lambert) // Carbohydr. Polym. – 2005. – T. 62, № 2. – P. 164–169. – DOI: 10.1016/j.carbpol.2005.07.019.
3. Barala P., Lohchab M., Hooda V. Carboxymethyl cellulose-based composite hydrogels for sustainable agriculture under drought stress // Polym. Adv. Technol. – 2025. – T. 36, № 1. – DOI: 10.1002/pat.70046.
4. Barba C. et al. Synthesis and characterization of carboxymethylcelluloses (CMC) from non-wood fibers. I. Accessibility of cellulose fibers and CMC synthesis // Cellulose. – 2002. – T. 9. – P. 319–326. – DOI: 10.1023/A:1021184509189.
5. Hastuti N. et al. Facile synthesis of carboxymethyl cellulose (CMC) from agricultural residues // Cellulose Chem. Technol. – 2024. – T. 58, № 5. – P. 455–466. – DOI: 10.35812/CelluloseChemTechnol.2024.58.43.
6. Pushpamalar V. et al. Optimization of reaction conditions for preparing carboxymethyl cellulose from sago waste // Carbohydr. Polym. – 2006. – T. 64, № 2. – P. 312–318. – DOI: 10.1016/j.carbpol.2005.12.003.
7. Rodsamran P., Sothornvit R. Carboxymethyl cellulose from rice stubble waste // Songklanakarin J. Sci. Technol. – 2020. – T. 42, № 2. – P. 454–460. – DOI: 10.14456/sjst-psu.2020.59.
8. Zhang S. et al. Characterization of carboxymethyl cellulose made from bamboo harvesting residues // J. Renew. Mater. – 2022. – T. 10, № 12. – P. 3229–3241. – DOI: 10.32604/jrm.2022.020489.
9. Zyadeh M.T. et al. Synthesis of cellulose-based hydrogel for regulating the release of nitrogen fertilizer // Cellulose Chem. Technol. – 2023. – T. 57, № 1. – P. 71–78. – DOI: 10.35812/CelluloseChemTechnol.2023.57.07.