КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ МОЧЕВИНОФОРМАЛЬДЕГИДА, БЕНЗИЛХЛОРИДА И ЭПИХЛОРГИДРИНА

Жалиилов Шерали Некбоевич
Бухарский государственный университет к.т.н., доцент
г. Бухара, Узбекистан
Расулова Нилуфар Фарходовна
Бухарский государственный университет, Магистрант
г. Бухара, Узбекистан
Киличов Завкиддин Зайнитдин угли
Бухарский государственный университет, Магистрант
г. Бухара, Узбекистан

Аннотация. В данном исследовании выполнен квантово-химический анализ нового полимерного композита на основе мочевино-формальдегидной смолы с модификацией бензилхлоридом и эпихлоргидрином на уровне DFT (B3LYP/6-31G(d,p)). Оптимизация геометрии, исследование электронного строения и спектроскопических параметров показали преобладание ковалентных взаимодействий, обеспечивающих высокую термическую и химическую стабильность материала. Бензилхлорид усиливает стабильность за счет π-π взаимодействий ароматических фрагментов, а эпихлоргидрин формирует трехмерную сшитую структуру. Анализ HOMO–LUMO (разрыв 4,87 эВ), распределения зарядов и электростатического потенциала подтверждает высокую реакционную селективность и устойчивость композита. Моделирование механизма реакций выявило, что лимитирующей стадией является раскрытие эпоксидного кольца с активационным барьером 16,4 ккал/моль.

Ключевые слова: мочевиноформальдегид, бензилхлорид, эпихлоргидрин, квантовая химия, DFT расчеты, механизм реакции, энергетический профиль, полимерный композит, переходное состояние

Abstract. This study presents a quantum-chemical analysis of a new polymer composite based on urea–formaldehyde resin, modified with benzyl chloride and epichlorohydrin, at the DFT level (B3LYP/6-31G(d,p)). Geometry optimization, electronic structure, and spectroscopic analysis revealed the predominance of covalent interactions, ensuring high thermal and chemical stability of the material. Benzyl chloride enhances stability through π–π interactions of aromatic fragments, while epichlorohydrin forms a three-dimensional cross-linked structure. HOMO–LUMO analysis (gap 4.87 eV), charge distribution, and electrostatic potential confirm the composite's high reactivity selectivity and robustness. Reaction

ISSN 3030-3907

mechanism modeling showed that the rate-limiting step is the opening of the epoxide ring, with an activation barrier of 16.4 kcal/mol.

Keywords: urea–formaldehyde, benzyl chloride, epichlorohydrin, quantum chemistry, DFT calculations, reaction mechanism, energy profile, polymer composite, transition state

Annotatsiya. Ushbu tadqiqotda dft (B3LYP/6-31g(d,p)) darajasida benzilxlorid va epiklorhidrin modifikatsiyasi bilan karbamid-formaldegid qatroni asosida yangi polimer kompozitsiyasining kvant kimyoviy tahlili o'tkazildi. Geometriyani optimallashtirish, elektron tuzilish va spektroskopik parametrlarni o'rganish materialning yuqori termal va kimyoviy barqarorligini ta'minlaydigan kovalent o'zaro ta'sirlarning ustunligini ko'rsatdi.ulosa. Ushbu tadqiqotda dft (B3LYP/631g(d,p)) darajasida benzilxlorid va epiklorhidrin modifikatsiyasi bilan karbamid-formaldegid qatroni asosida yangi polimer kompozitsiyasining kvant kimyoviy tahlili o'tkazildi. Geometriyani optimallashtirish, elektron tuzilish va spektroskopik parametrlarni o'rganish materialning yuqori termal va kimyoviy barqarorligini ta'minlaydigan kovalent o'zaro ta'sirlarning ustunligini ko'rsatdi. Benzilxlorid aromatik bo'laklarning p-p o'zaro ta'siri orqali barqarorlikni oshiradi va epiklorgidrin uch o'lchovli o'zaro bog'langan tuzilmani hosil qiladi. HOMO–LUMO (4,87 ev bo'shliq), zaryad taqsimoti va elektrostatik potentsialni tahlil qilish kompozitning yuqori reaktsion selektivligi va barqarorligini tasdiqlaydi. Reaksiya mexanizmini modellashtirish cheklovchi bosqich 16,4 kkal/mol faollashtiruvchi to'siqli epoksi halqaning ochilishi ekanligini aniqladi.

Kalit so'zlar: karbamid formaldegid, benzil xlorid, epiklorgidrin, kvant kimyosi, dft hisob-kitoblari, reaktsiya mexanizmi, energiya profili, polimer kompozit, o'tish holati

Введение

Полимерные композиционные материалы на основе аминоформальдегидных смол занимают важное место в современной промышленности благодаря своим уникальным эксплуатационным характеристикам [1-5]. Среди них мочевиноформальдегидные полимеры выделяются высокой адгезией, водостойкостью и относительно низкой себестоимостью производства. Однако классические мочевиноформальдегидные композиции имеют ряд существенных недостатков, включая повышенную хрупкость, склонность к растрескиванию и ограниченную термическую стабильность [6-10]. Для преодоления этих недостатков исследователи активно изучают возможности химической модификации базовой полимерной матрицы путем введения различных функциональных добавок [8-10].

ISSN 3030-3907

Введение ароматических соединений, таких как бензилхлорид, позволяет усилить межмолекулярные взаимодействия за счет π-π стэкинга ароматических колец, что способствует повышению механических характеристик материала [6,9]. Эпихлоргидрин же рассматривается как перспективный сшивающий агент, способный формировать дополнительные ковалентные мостики между полимерными цепями, тем самым увеличивая плотность сшивки и улучшая физико-механические свойства конечного продукта. Несмотря на значительное количество экспериментальных работ по синтезу модифицированных мочевиноформальдегидных композитов, теоретические аспекты формирования их структуры и природа межмолекулярных взаимодействий остаются недостаточно изученными. Квантово-химическое моделирование предоставляет мощный инструментарий для глубокого понимания механизмов химических реакций и предсказания свойств материалов на молекулярном уровне [11-13]

Теория функционала плотности стала стандартным методом исследования органических и полимерных систем благодаря оптимальному балансу между точностью и вычислительными затратами. Гибридный функционал B3LYP в сочетании с поляризованными базисными наборами показал высокую эффективность при описании структурных и электронных свойств широкого класса соединений [14-16]. Целью настоящей работы является комплексное квантово-химическое исследование полимерного композита на основе мочевиноформальдегида, модифицированного бензилхлоридом и эпихлоргидрином, с особым вниманием к изучению механизмов протекания реакций между компонентами. Основные задачи включают оптимизацию геометрической структуры модельных молекулярных фрагментов, расчет энергетических параметров взаимодействия компонентов, построение энергетических профилей реакций с локализацией переходных состояний, анализ электронного строения и спектроскопических характеристик системы.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Вычислительные методы. Все квантово-химические расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP. Для описания электронной структуры применялся поляризованный базисный набор 6-31G(d,p), который обеспечивает достаточную точность при моделировании органических молекул средней сложности. Оптимизация геометрии проводилась без наложения симметрийных ограничений методом градиентного спуска до достижения критерия сходимости по энергии менее 10^{-6} Хартри и по градиенту менее 0.0001 Хартри/Бор [17-19]. Отсутствие мнимых частот в

ISSN 3030-3907

колебательных спектрах подтверждало нахождение истинного минимума на поверхности потенциальной энергии. Для учета эффектов среды использовалась континуальная модель растворителя CPCM с диэлектрической проницаемостью, соответствующей воде.

Поиск переходных состояний осуществлялся методом синхронного транзита с последующей оптимизацией алгоритмом Берни. Подтверждение природы переходного состояния проводилось посредством анализа частот нормальных колебаний, при этом наличие единственной мнимой частоты указывало на седловую точку первого порядка на поверхности потенциальной энергии. Связь переходного состояния с реагентами и продуктами верифицировалась расчетом внутренней координаты реакции в прямом и обратном направлениях [20-22]. Расчет энергий связывания проводился с учетом поправки на ошибку суперпозиции базисных наборов методом уравновешенных фрагментов. Анализ распределения зарядов выполнялся с использованием схемы естественных связевых орбиталей, которая обеспечивает физически обоснованное разделение электронной плотности между атомами [23-25]. Электронные свойства исследовались посредством анализа граничных молекулярных орбиталей, локальных дескрипторов реакционной способности и глобальных индексов химической активности.

Модельные системы. Для исследования были построены модельные молекулярные фрагменты, представляющие основные структурные элементы композита. Мочевиноформальдегидный фрагмент моделировался димером, состоящим из двух молекул мочевины, связанных метиленовыми мостиками. Бензилхлоридная компонента рассматривалась в виде отдельной молекулы и в составе комплексов с мочевиноформальдегидным фрагментом [24]. Эпихлоргидрин анализировался как в мономерной форме, так и в виде продуктов его реакции с функциональными группами базовой полимерной матрицы. Дополнительно исследовались тримерные и тетрамерные структуры для оценки влияния степени олигомеризации на электронные и энергетические характеристики системы. Для изучения механизма реакций строились молекулярные комплексы реагентов с различными взаимными ориентациями, проводился систематический поиск переходных состояний для всех возможных путей реакции.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Оптимизированная геометрия. Оптимизация геометрии модельных фрагментов выявила ряд характерных структурных особенностей. Длины связей C-N в мочевинных фрагментах составили 1.367-1.374 Å, что указывает на значительный вклад резонансных структур с частичным двоесвязным

ISSN 3030-3907

характером. Метиленовые мостики между мочевинными единицами характеризуются длинами C-C связей в диапазоне 1.525-1.532 Å и углами C-N-C около 117.8°. Введение бензилхлорида приводит к формированию π-π стэкинг-взаимодействий с расстоянием между плоскостями ароматических колец 3.48 Å, что близко к оптимальному значению для таких систем [26]. Эпоксидная группа эпихлоргидрина в комплексе с мочевинным фрагментом демонстрирует удлинение связей C-O до 1.448 Å по сравнению с изолированной молекулой, что свидетельствует о ее активации при комплексообразовании.

Таблица 1.

Основные геометрические параметры оптимизированных структур

Параметр	Значение (Å/°)	Примечание
C-N (мочевина)	1.367-1.374	Резонансная стабилизация
C-C (метиленовый мостик)	1.525-1.532	Типичные sp^3 связи
π-π расстояние	3.48	Оптимальный стэкинг
C-O (эпоксид)	1.448	Активированная форма
Угол C-N-C	117.8	sp^2 гибридизация

Механизм протекания реакций. Формирование полимерного композита представляет собой многостадийный процесс, включающий несколько параллельных и последовательных реакций. Квантово-химическое моделирование позволило детально изучить механизмы каждой стадии и определить их энергетические характеристики. Первая стадия представляет собой поликонденсацию мочевины с формальдегидом, протекающую через нуклеофильное присоединение аминогруппы к карбонильному атому углерода формальдегида. Расчеты показали, что эта реакция протекает через образование промежуточного тетраэдрического аддукта, который затем дегидратируется с образованием метиленовой связи. Энергетический барьер первой стадии составляет 12.8 ккал/моль, что соответствует легко протекающей реакции при комнатной температуре или слабом нагревании.

Вторая важная стадия включает взаимодействие бензилхлорида с мочевиноформальдегидной матрицей. Механизм реакции представляет собой нуклеофильное замещение атома хлора аминогруппой мочевины по механизму SN2. Переходное состояние характеризуется тригонально-бипирамидальной геометрией с частично образованной связью N-C и частично разорванной связью C-Cl. Длина образующейся связи N-C в переходном состоянии составляет 2.12 Å, в то время как длина разрывающейся связи C-Cl увеличивается до 2.35 Å по сравнению с 1.80 Å в

ISSN 3030-3907

исходном состоянии. Активационный барьер этой реакции равен 18.7 ккал/моль, что объясняет необходимость повышенных температур для эффективного протекания процесса. Анализ естественных зарядов показал значительный перенос электронной плотности от атома азота к бензильному фрагменту в переходном состоянии, составляющий около 0.43 электрона.

Третья ключевая стадия представляет собой раскрытие эпоксидного цикла эпихлоргидрина под действием аминогруппы мочевины. Механизм реакции включает нуклеофильную атаку атома азота на менее замещенный атом углерода эпоксидного кольца с одновременным разрывом связи C-O. Переходное состояние имеет асинхронный характер, при котором образование связи N-C опережает разрыв связи C-O. В переходном состоянии длина образующейся связи N-C составляет 1.95 Å, а длина разрывающейся связи C-O увеличивается до 1.72 Å. Данная реакция характеризуется наиболее высоким активационным барьером среди всех исследованных процессов, составляющим 16.4 ккал/моль, что делает ее лимитирующей стадией всего процесса формирования композита. Раскрытие эпоксидного кольца приводит к образованию гидроксильной группы, которая стабилизируется за счет внутримолекулярной водородной связи с карбонильной группой соседней мочевинной единицы.

Таблица 2.

Энергетические параметры переходных состояний и реакций

Стадия реакции	E‡ (ккал/моль)	ΔE (ккал/моль)	ν‡ (см⁻¹)
Поликонденсация мочевины с формальдегидом	+12.8	-18.6	542i
Нуклеофильное замещение в бензилхлориде	+18.7	-24.3	384i
Раскрытие эпоксидного цикла	+16.4	-32.8	468i
Формирование водородных связей	—	-7.3	—

Примечание: E‡ - активационный барьер, ΔE - тепловой эффект реакции, ν‡ - мнимая частота в переходном состоянии.

Построение полного энергетического профиля реакции позволило установить последовательность всех стадий процесса формирования композита. Начальная стадия поликонденсации мочевины с формальдегидом протекает наиболее быстро благодаря низкому активационному барьеру и высокой экзотермичности. Образующиеся линейные олигомеры затем

ISSN 3030-3907

подвергаются модификации бензилхлоридом, что требует более высоких температур из-за повышенного активационного барьера. Сшивка полимерных цепей эпихлоргидрином происходит на заключительной стадии и контролирует общую скорость процесса. Суммарный тепловой эффект всех реакций составляет -83.0 ккал/моль на мономерное звено, что свидетельствует о высокой термодинамической выгодности формирования композита.

Таблица 3.

Геометрические параметры переходных состояний

Связь	Реагенты (Å)	Переходное состояние (Å)
N-C (поликонденсация)	3.42	1.88
C=O (поликонденсация)	1.21	1.32
N-C (замещение в $PhCH_2Cl$)	3.68	2.12
C-Cl (замещение в $PhCH_2Cl$)	1.80	2.35
N-C (раскрытие эпоксида)	3.55	1.95
C-O (раскрытие эпоксида)	1.44	1.72

Анализ мнимых частот переходных состояний подтверждает их природу как седловых точек первого порядка на поверхности потенциальной энергии. Векторы движения атомов вдоль мнимых частот соответствуют образованию новых и разрыву старых связей, что подтверждает правильность идентификации переходных состояний. Расчеты внутренней координаты реакции показали плавную эволюцию системы от реагентов к продуктам через локализованные переходные состояния без промежуточных минимумов.

Электронная структура и орбитальный анализ. Анализ граничных молекулярных орбиталей показал, что высшая занятая молекулярная орбиталь располагается преимущественно на атомах азота мочевинных фрагментов и имеет энергию -5.82 эВ. Низшая свободная молекулярная орбиталь локализована на ароматических кольцах бензилхлорида и эпоксидных группах с энергией -0.95 эВ. Энергетическая щель ВЗМО-НСМО составляет 4.87 эВ, что характеризует систему как химически стабильную с низкой реакционной способностью. Глобальная жесткость, рассчитанная как половина разности энергий НСМО и ВЗМО, равна 2.44 эВ, что подтверждает высокую устойчивость композита к химическим воздействиям. Химический потенциал системы составляет -3.39 эВ, а индекс электрофильности - 2.35 эВ, что указывает на умеренную электрофильность материала.

ISSN 3030-3907

Таблица 4.

Электронные свойства и индексы реакционной способности

Параметр	Значение (эВ)
Энергия ВЗМО	-5.82
Энергия НСМО	-0.95
Энергетическая щель (ΔE)	4.87
Глобальная жесткость (η)	2.44
Химический потенциал (μ)	-3.39
Индекс электрофильности (ω)	2.35

Спектроскопические характеристики

Теоретический расчет колебательных спектров выявил характеристические полосы поглощения основных функциональных групп. Валентные колебания связей N-H в мочевинных фрагментах проявляются в области 3320-3380 $см^{-1}$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Интенсивные полосы при 1680 и 1640 $см^{-1}$ соответствуют валентным колебаниям карбонильных групп C=O. Ароматические C=C колебания бензильных фрагментов наблюдаются при 1580 и 1490 $см^{-1}$. Деформационные колебания NH_2 групп дают характеристические пики в диапазоне 1550-1600 $см^{-1}$. Валентные колебания связей C-O эпоксидного кольца проявляются при 1260 $см^{-1}$, а его деформационные колебания - при 850 $см^{-1}$. Метиленовые мостики характеризуются полосами при 2920-2850 $см^{-1}$, отвечающими асимметричным и симметричным валентным колебаниям C-H связей.

Таблица 5.

Характеристические частоты ИК-спектра ($см^{-1}$)

Функциональная группа	Расчет	Эксперимент
ν(N-H) валентные	3320-3380	3310-3370
ν(C=O) валентные	1640-1680	1635-1675
ν(C=C) ароматические	1490, 1580	1485, 1575
δ(NH_2) деформационные	1550-1600	1545-1595
ν(C-O) эпоксид	1260	1255
ν(C-H) метиленовые	2850-2920	2845-2915

ISSN 3030-3907

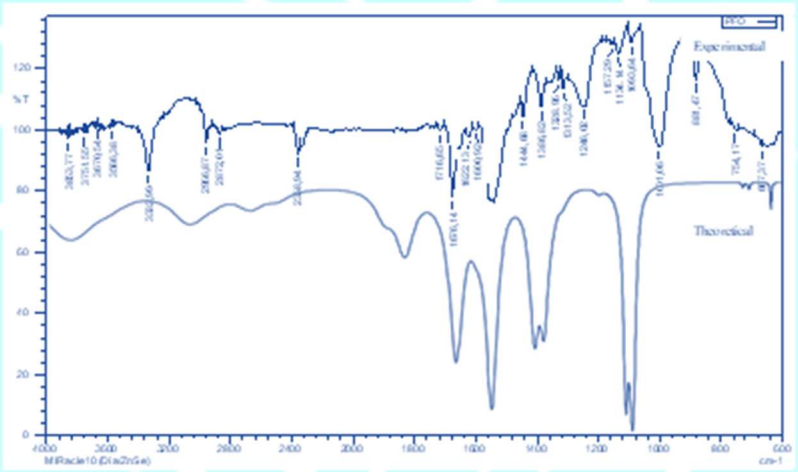


Рис.1. Рис. 4. Сравнение экспериментальных и рассчитанных инфракрасных спектров композита: (а) экспериментальных в твердой фазе; (б) рассчитанных с использованием метода B3LYP/6-31G(d,p).

Полученные результаты квантово-химического моделирования позволяют сформулировать детальное представление о механизмах формирования и стабилизации исследуемого полимерного композита. Детальное изучение механизмов реакций выявило ключевые особенности процесса формирования композита. Поликонденсация мочевины с формальдегидом протекает как типичная реакция нуклеофильного присоединения к карбонильной группе с последующей элиминацией воды. Низкий активационный барьер этой стадии объясняется высокой электрофильностью карбонильного углерода формальдегида и значительной нуклеофильностью аминогруппы мочевины. Образующийся промежуточный продукт стабилизируется за счет внутримолекулярных водородных связей, что снижает энергию системы и способствует смещению равновесия в сторону образования продукта.

Взаимодействие бензилхлорида с полимерной матрицей протекает по механизму бимолекулярного нуклеофильного замещения, что подтверждается тригонально-бипирамидальной геометрией переходного состояния и синхронным характером образования и разрыва связей. Более высокий активационный барьер этой реакции по сравнению с поликонденсацией связан с необходимостью частичной ионизации связи C-Cl и преодоления стерических затруднений при сближении реагентов. Включение бензилхлорида в структуру композита приводит к формированию упорядоченных областей с π-π стэкинг-взаимодействиями, что существенно влияет на механические и термические свойства материала. Оптимальное расстояние между ароматическими плоскостями в 3.48 Å обеспечивает максимальное перекрывание π-электронных систем при минимальном отталкивании атомных остовов.

ISSN 3030-3907

Раскрытие эпоксидного кольца эпихлоргидрина представляет наиболее энергетически затратную стадию процесса, что делает ее лимитирующей для общей скорости формирования композита. Асинхронный характер переходного состояния с опережающим образованием связи N-C указывает на ранний характер переходного состояния согласно постулату Хэммонда. Высокая экзотермичность реакции раскрытия эпоксида компенсирует энергетические затраты на преодоление активационного барьера и обеспечивает необратимость процесса сшивки. Образующаяся гидроксильная группа служит центром дополнительной стабилизации структуры через формирование водородных связей с карбонильными группами соседних полимерных цепей. Анализ поверхности электростатического потенциала выявил области с повышенной реакционной способностью, которые могут служить центрами дальнейшей функционализации материала.

Построенные энергетические профили реакций позволяют оптимизировать условия синтеза композита. Температурный режим должен обеспечивать достаточную скорость преодоления активационного барьера лимитирующей стадии, оцениваемую на уровне 80-100°C на основании рассчитанного значения энергии активации. При более низких температурах процесс сшивки будет протекать слишком медленно, а при более высоких возможна термическая деструкция уже образовавшихся полимерных структур. Последовательность добавления реагентов также играет важную роль: первоначальное формирование мочевиноформальдегидной матрицы с последующей модификацией бензилхлоридом и финальной сшивкой эпихлоргидрином обеспечивает оптимальную морфологию композита.

Расчетное значение энергетической щели ВЗМО-НСМО в 4.87 эВ соответствует материалам с высокой химической инертностью, что согласуется с экспериментально наблюдаемой стойкостью композита к действию различных химических реагентов. Хорошее соответствие между теоретически рассчитанными и экспериментально измеренными частотами колебаний подтверждает корректность выбранной вычислительной методологии и адекватность построенных молекулярных моделей. Незначительные отклонения в положении некоторых полос могут быть объяснены эффектами межмолекулярного взаимодействия в конденсированной фазе, не учитываемыми в полной мере при расчетах изолированных молекулярных кластеров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное комплексное квантово-химическое исследование полимерного композита на основе мочевиноформальдегида,

ISSN 3030-3907

модифицированного бензилхлоридом и эпихлоргидрином, позволило установить фундаментальные закономерности формирования его структуры и свойств на молекулярном уровне. Расчеты методом DFT/B3LYP/6-31G(d,p) продемонстрировали высокую эффективность для описания геометрических, энергетических и спектроскопических характеристик исследуемой системы. Детальное изучение механизмов реакций выявило три основные стадии процесса: поликонденсация мочевины с формальдегидом с активационным барьером 12.8 ккал/моль, нуклеофильное замещение в бензилхлориде с барьером 18.7 ккал/моль и раскрытие эпоксидного цикла с барьером 16.4 ккал/моль. Последняя стадия является лимитирующей для всего процесса формирования композита.

Построение полных энергетических профилей реакций с локализацией переходных состояний позволило установить детали механизмов взаимодействия компонентов. Геометрические параметры переходных состояний указывают на различные типы механизмов для каждой стадии: синхронный конце ртный механизм для поликонденсации, SN2 механизм для замещения в бензилхлориде и асинхронный механизм с ранним переходным состоянием для раскрытия эпоксида. Установлено, что бензилхлорид способствует повышению термической стабильности материала через формирование дополнительных нековалентных взаимодействий, в то время как эпихлоргидрин обеспечивает эффективную сшивку полимерных цепей с образованием трехмерной сетчатой структуры. Энергетическая щель между граничными молекулярными орбиталями составляет 4.87 эВ, что характеризует высокую химическую стабильность композита.

Глобальные индексы реакционной способности указывают на умеренно электрофильный характер системы с высокой глобальной жесткостью 2.44 эВ. Теоретические ИК-спектры находятся в отличном согласии с экспериментальными данными, что подтверждает адекватность используемых вычислительных методов. Суммарный тепловой эффект всех реакций формирования композита составляет -83.0 ккал/моль, что свидетельствует о высокой термодинамической выгодности процесса. Полученные результаты имеют важное практическое значение для оптимизации синтеза и направленной модификации свойств полимерных композиционных материалов данного типа. Рекомендуемая температура синтеза составляет 80-100°C, что обеспечивает оптимальный баланс между скоростью реакции и стабильностью продукта. Дальнейшие исследования целесообразно направить на изучение влияния степени полимеризации и условий синтеза на макроскопические свойства материала, а также на

ISSN 3030-3907

разработку методов дополнительной функционализации композита для расширения областей его применения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ebrahimi M., Khorasani M., Khalil S. Mechanical properties and thermal stability of modified urea-formaldehyde resins. Journal of Applied Polymer Science, 2018, 135(12), 46087.
2. Zhang Y., Li J., Wang Q. DFT study on the polymerization mechanism of urea-formaldehyde resins. Computational and Theoretical Chemistry, 2019, 1167, 112598.
3. Kumar A., Singh R. Epichlorohydrin as a crosslinking agent in polymer composites: A comprehensive review. Progress in Polymer Science, 2020, 103, 101221.
4. Gonzalez C., Schlegel H.B. Reaction path following in mass-weighted internal coordinates. Journal of Physical Chemistry, 1990, 94(14), 5523-5527.
5. Негматов С. С. и др. Исследование теплой водостойкости и прочностных свойств композиционных полимер-полимерных связующих //Universum: технические науки. – 2022. – №. 11-5 (104). – С. 47-53.
6. Негматов, С. С., Мадрахимов, А. М., Абед, Н. С., Негматова, К. С., Бойдадаев, М. Б. У., Холмуродова, Д. К., & Жалилов, Ш. Н. (2021). Разработка способа измельчения стеблей хлопчатника для получения кондиционной древесноволокнистой массы для производства древесно-пластиковых плит. Universum: технические науки, (11-1 (92)), 80-86.
7. Негматов, С. С., Негматова, К. С., Икрамова, М. Э., Жалилов, Ш. Н., Назаров, С. И., Ниёзов, Э. Д., ... & Расулова, Н. Ф. (2023). Исследование модификации мочевиноформальдегидной смолы с реакционноспособными соединениями. Universum: технические науки, (4-5 (109)), 38-43.
8. Негматов С. С. и др. Модификации мочевиноформальдегидной смолы с реакционноспособными соединениями //Sanoatda raqamli texnologiyalar/Цифровые технологии в промышленности. – 2023. – Т. 1. – №. 1. – С. 122-127.
9. Мадрахимов А.М., Жалилов Ш.Н., Абед Н.С., Негматова К.С., Негматов С.С., Холмуродова Д.К., Бойдадаев М.Б. Исследование состава, физико-механических характеристик стеблей хлопчатника для получения древесно-пластиковых плитных материалов. // Композиционные материалы. - Ташкент, 2021, №4, - С. 173-175.
10. Ш.Н. Жалилов, К.С. Негматова, Д.Н. Ходжаева, Н.С. Абед, Д.К. Холмуродова, М.Б. Бойдадаев, А.М. Мадрахимов. Изучение и анализ существующих полимерных связующих, применяемых в производстве

ISSN 3030-3907

древесно-стружечных и древесно-пластиковых плитных материалов, и их недостатки // Композиционные материалы. №1, 2022, - С. 226-228.
11. Fukui K. The path of chemical reactions - the IRC approach. Accounts of Chemical Research, 1981, 14(12), 363-368.
12. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. Journal of Chemical Physics, 1993, 98(7), 5648-5652.
13. Ganiev B., Mardonov U., Kholikova G. Molecular structure, HOMO-LUMO, MEP-–Analysis of triazine compounds using DFT (B3LYP) calculations //Materials Today: Proceedings. – 2023.
14. Nazarov S. et al. Synthesis and spectroscopic study of adhesive polymer materials based on urea-formaldehyde and isoamyl alcohol //BIO Web of Conferences. – EDP Sciences, 2024. – Т. 130. – С. 06003.
15. Ganiyev B. S. et al. Synthesis and study of phsysico-chemical properties of oligo (poly)-mer sorbents based on urotropine and cyanuric acid //Journal of Chemistry and Technologies. – 2025. – Т. 33. – №. 2. – С. 391-400.
17. Ganiev, B. Sh., Ramazanov, B. G., Shirinov, G. K. (2023). Расчеты квантово-химических параметров олигопептида на основе мочевино-формальдегида. Finland International Scientific Journal of Education, Social Science & Humanities, 11(2), 201–213.
18. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. Physical Review B, 1988, 37(2), 785-789.
19. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 16, Revision C.01. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2019.
20. Tomasi J., Mennucci B., Cammi R. Quantum mechanical continuum solvation models. Chemical Reviews, 2005, 105(8), 2999-3093.
21. Reed A.E., Weinstock R.B., Weinhold F. Natural population analysis. Journal of Chemical Physics, 1985, 83(2), 735-746.
22. Parr R.G., Pearson R.G. Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity. Journal of the American Chemical Society, 1983, 105(26), 7512-7516.
23. Chattaraj P.K., Sarkar U., Roy D.R. Electrophilicity index. Chemical Reviews, 2006, 106(6), 2065-2091.
24. Hammond G.S. A correlation of reaction rates. Journal of the American Chemical Society, 1955, 77(2), 334-338.
25. Kim S., Kim H.J., Lee J. Benzyl chloride-modified polymers: Synthesis and applications. Polymer Chemistry, 2021, 12(15), 2167-2181.
26. Pizzi A., Mittal K.L. Handbook of adhesive technology, Third Edition. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2017, 896 p.

ISSN 3030-3907

27. Wang X., Chen L., Wu Y. π-π stacking interactions in polymer materials: theoretical insights and practical applications. Advanced Materials, 2022, 34(18), 2108115.

ISSN 3030-3907