

Структурный анализ композитов ZnO/окисленная целлюлоза

Б.Н. Мамадиев, Н.Ш. Ашуров, А.А. Атаханов

Институт химии и физики полимеров АН РУз, 100128, г.Ташкент, ул. А.Кадыри 76, e-mail: polymer@academy.uz

Оксид цинка (ZnO) является одним из наиболее перспективных материалов, обладающих высокой экологической безопасностью, химической стабильностью и выраженными фото-, пьезо- и антимикробными свойствами [1-2]. Особый интерес представляет конструирование гибридных материалов на основе ZnO и природных полимеров, в частности окисленной наноцеллюлозы (ОНЦ). Введение функциональных кислородсодержащих групп в целлюлозную матрицу создаёт дополнительные центры комплексообразования для ионов Zn^{2+} , что позволяет управлять процессами нуклеации и роста кристаллических фаз [3]. Такой подход открывает путь к созданию биосовместимых, биоразлагаемых и функционально активных материалов для биомедицины, катализа и экологии [4]. Однако фундаментальные аспекты взаимодействия фаз ZnO с полярными группами окисленной целлюлозы, влияние матрицы на кристаллографические параметры и иерархическую морфологию остаются недостаточно изученными. Настоящая работа посвящена комплексному анализу фазового состава и микроструктурной организации композитов ZnO+ОНЦ.

Рентгенофазовый анализ выявил наличие двух кристаллических модификаций оксида цинка в синтезированных образцах. Доминирующей является гексагональная фаза вюрцита с параметрами элементарной ячейки $a = 3.25 \text{ \AA}$, $c = 5.21 \text{ \AA}$. Эти значения хорошо согласуются с литературными данными для гексагонального вюрцита ($a=3.24\text{--}3.25 \text{ \AA}$, $c=5.20 \text{ \AA}$) [5]. Рассчитанная величина деформации решётки составляет всего 0,158 %, что свидетельствует о высокой степени кристаллической упорядоченности и незначительных искажениях решётки. Столь малые деформации характерны для крупных кристаллитов, формирующихся в условиях, близких к равновесным, что коррелирует с классической моделью Оствальдовского созревания. Вторая фаза идентифицирована как метастабильный вульфингит (орторомбическая сингония) с параметрами $a = 4.94 \text{ \AA}$, $b = 8.41 \text{ \AA}$, $c = 4.93 \text{ \AA}$. Появление этой фазы, обычно нестабильной при нормальных условиях, обусловлено, вероятно, кинетическими ограничениями и поверхностными эффектами в наноразмерном состоянии, а также взаимодействием с гидроксильными группами целлюлозы.

Интересно, что введение ОНЦ приводит к возрастанию деформации решётки вульфингита до 0.335 %, что почти вдвое превышает аналогичный показатель для вюрцита. Это различие указывает на избирательное механическое воздействие макромолекул целлюлозы на разные кристаллографические направления. Вероятно,

полярные функциональные группы ОНЦ создают анизотропные внутренние напряжения, которые сильнее влияют на менее симметричную орторомбическую решётку, что согласуется с теорией упругих деформаций в гетерогенных системах.

Карбоксильные и гидроксильные группы, выступающие в роли центров координации для Zn^{2+} , что является прямым экспериментальным подтверждением гетерогенной нуклеации по механизму «роста на активных центрах», что согласуется с моделями Стронского-Крастанова для систем полимер-неорганика.

При этом полимерная цепь оказывает стерическое затруднение, ограничивая неограниченное развитие кристаллитов, что приводит к формированию нано- и субмикронных агрегатов.

Установлена корреляция между фазовым составом и морфологией: основная вюрцитная фаза формирует кристаллиты с менее выраженной анизотропией, в то время как метастабильный вульфингит, вероятно, локализуется в тонких поверхностных слоях и проявляет повышенную чувствительность к механическим напряжениям со стороны полимера. Различие в деформациях (0.158 % против 0.335 %) позволяет сделать вывод о том, что целлюлозная матрица выступает не только инертным носителем, но и активным участником структурообразования, влияя на межатомные расстояния и симметрию решётки.

Проведённое исследование показало, что окисленная целлюлоза является эффективной матрицей для направленного формирования композитов с ZnO, проявляющих двойственный фазовый состав (вюрцит+вульфингит) и двухуровневую иерархическую морфологию. Установлено, что полимерная составляющая индуцирует селективные деформации кристаллических решёток, зависящие от симметрии фазы, что может быть использовано как инструмент модуляции свойств. Полученные результаты закладывают фундаментальную основу для создания нового класса биосовместимых и функционально активных гибридных материалов с прогнозируемой структурой и свойствами.

1. Özgür Ü., Alivov Ya.I., Liu C., et al. Journal of Applied Physics, 2005, 98, 041301.
2. Wang Z.L. Journal of Physics: Condensed Matter, 2004, 16, R829–R858.
3. Fujisawa S., Saito T., Kimura S., et al. Cellulose, 2017, 24, 4861–4870.
4. Gowthami S., Ravindran L., Sethu Lakshmi M.B., et al. Applied Research, 2025, 4(4), e70030.
5. Suciati S.W., Prastica L., Supriyanto A., et al. Jurnal ilmiah pendidikan fisika Al-Biruni, 2025, 14(2), 71-86.