Fe_2O_3 ASOSIDAGI PIGMENTLARNING SELLYULOZA VA IPAK TOLALARIGA SORBSIYASINING MOLEKULYAR TAHLILI

Hamroyev.O.B.
Ganiyev.B.Sh.
Mardonov.O'.M.
Buxoro Davlat Universiteti
Doi: https://doi.org/10.5281/zenodo.20353730

Annotatsiya

Ushbu maqolada temir (III) oksid (Fe_2O_3) asosidagi pigmentlarning sellyuloza (paxta) va ipak tolalariga sorbsiyalanish mexanizmlari kompleks tahlil qilingan va Fe_2O_3ni sanoat gazli chiqindilari — asosan temir eritish pechlari hamda metallurgiya gazlari — tarkibidagi chang va aerozol zarrachalaridan ajratib olishning texnologik jarayonlari batafsil ko'rib chiqilgan. Tadqiqot ikkita asosiy yo'nalishni qamrab oladi: adabiyot ma'lumotlari asosida sorbsiya nazariyasini tizimlashtirish hamda gazli muhitdan Fe_2O_3 ajratib olishda qo'llaniladigan quruq va ho'l tozalash texnologiyalari, siklonli separatorlar, elektrostatik filtrlar va matoli filtrlar samaradorligini qiyosiy baholash. Fe_2O_3 zarrachalarining sellyuloza –OH guruhlari bilan vodorod bog'lari va koordinatsion bog'lar orqali, ipak fibroinining $–NH_2$ va –COOH guruhlari bilan esa elektrostatik va donor-akseptor mexanizmlari orqali ta'sirlashishi aniqlangan. Adsorbsiya izotermalari Langmuir modeliga, kinetika esa psevdo-ikkinchi tartib tenglamasiga muvofiq kelishi adabiyotlar tahlili natijasida tasdiqlangan. Ipak tolasi amfoter tabiati tufayli Fe_2O_3 pigmentini paxtaga qaraganda nisbatan yuqori darajada sorbsiyalashi ko'rsatilgan. Olingan natijalar Fe_2O_3 asosidagi bo'yoq tizimlarini takomillashtirish va yangi funksional to'qimachilik materiallarini yaratish uchun asos bo'la oladi.

Kalit so'zlar: temir (III) oksid; Fe_2O_3; pigment; sellyuloza; ipak fibroini; sorbsiya; Langmuir izoterma; gazli chiqindi; siklonli separator; elektrostatik filtr; matoli filtr; texnologik jarayon

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ АНАЛИЗ СОРБЦИИ ПИГМЕНТОВ НА ОСНОВЕ Fe_2O_3 НА ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ И ШЁЛКОВЫХ ВОЛОКНАХ

Аннотация

В данной статье проведён комплексный анализ механизмов сорбции пигментов на основе оксида железа (III) (Fe_2O_3) на целлюлозных (хлопковых) и шёлковых волокнах, а также рассмотрены технологические процессы выделения Fe_2O_3 из газообразных промышленных отходов — преимущественно из газов доменного и сталеплавильного производства. Исследование охватывает два основных направления: систематизацию теории сорбции на основе литературных данных, а также сравнительный анализ технологий сухой и мокрой газоочистки, циклонных сепараторов, электрофильтров и рукавных фильтров для улавливания частиц Fe_2O_3. Установлено, что частицы Fe_2O_3 взаимодействуют с гидроксильными группами (–OH) целлюлозы посредством водородных и координационных связей, а с группами $–NH_2$ и –COOH фиброина шёлка — через электростатические и донорно-акцепторные механизмы. По результатам анализа литературы подтверждено соответствие изотерм адсорбции модели Ленгмюра, а кинетики — уравнению псевдовторого порядка. Показано, что шёлковое волокно, благодаря амфотерной природе, сорбирует пигмент Fe_2O_3 в несколько большей степени по сравнению с хлопком. Полученные результаты могут служить основой для

совершенствования красящих систем на основе Fe_2O_3 и создания новых функциональных текстильных материалов.

Ключевые слова: оксид железа (III); Fe_2O_3; пигмент; целлюлоза; фиброин шёлка; сорбция; изотерма Ленгмюра; молекулярное моделирование; водородная связь; координационная связь

ВВЕДЕНИЕ

В текстильной промышленности процесс крашения является одним из важнейших технологических этапов, определяющих качество готовой продукции. В условиях возрастающей обеспокоенности вопросами экологической безопасности органических красителей усиливается интерес к неорганическим пигментам, в частности к соединениям оксида железа [1, 2].

Оксид железа (III) — Fe_2O_3 — неорганическое соединение, встречающееся в природе в минерале гематит и обладающее характерным красно-коричневым цветом. Данный пигмент отличается рядом преимуществ: высокой химической стабильностью, устойчивостью к свету и температуре, экологической безопасностью и относительно низкой стоимостью [3, 4]. Большая удельная поверхность и активные поверхностные группы наночастиц Fe_2O_3 обеспечивают их эффективное взаимодействие с волокнами тканей [5].

Тем не менее механизмы сорбции пигмента Fe_2O_3 на целлюлозных и белковых волокнах изучены недостаточно полно. Цепочка целлюлозы, составляющей основу хлопкового волокна, содержит многочисленные свободные гидроксильные группы (–OH), способные образовывать различные химические связи с частицами пигмента. Фиброин шёлка представляет собой амфотерный полипептид, в цепях которого присутствуют группы $–NH_2$, –COOH и пептидные связи (–CO–NH–) [6]. Различие в химическом строении этих двух волокон обусловливает существенную разницу в их способности сорбировать пигмент Fe_2O_3.

Целью настоящей работы является комплексный анализ механизмов сорбции пигментов на основе Fe_2O_3 на хлопковом (целлюлозном) и шёлковом волокнах на основе литературных данных и результатов молекулярного моделирования, а также сравнительная оценка сорбционных характеристик двух типов волокон.

Научная новизна: Впервые проведён сравнительный анализ технологических процессов выделения Fe_2O_3 из газообразных промышленных выбросов (сухие и мокрые методы, электрофильтры, циклонные сепараторы) и дана комплексная оценка их влияния на сорбционную эффективность получаемого пигмента применительно к целлюлозным и шёлковым волокнам; параметры адсорбции систематизированы на основе сравнительного анализа.

MOLECULAR ANALYSIS OF Fe_2O_3-BASED PIGMENT SORPTIONON CELLULOSE AND SILK FIBERS

Abstract

This article presents a comprehensive analysis of the sorption mechanisms of iron(III) oxide (Fe_2O_3)-based pigments onto cellulose (cotton) and silk fibers, and examines the technological processes for recovering Fe_2O_3 from industrial gas emissions — primarily from iron and steel smelting furnace gases. The study covers two main directions: a systematic review of sorption theory based on literature data, and a comparative assessment of dry and wet gas-cleaning technologies, cyclone separators, electrostatic precipitators, and fabric (bag) filters for capturing Fe_2O_3 particles. It was established that Fe_2O_3 particles interact with the hydroxyl (–OH) groups of cellulose via hydrogen and coordination bonds, while interaction with the $–NH_2$ and –COOH groups of silk fibroin proceeds through

electrostatic and donor-acceptor mechanisms. Analysis of published literature confirms that the adsorption isotherms follow the Langmuir model and the kinetics obey the pseudo-second-order equation. It is demonstrated that silk fiber, due to its amphoteric nature, sorbs Fe_2O_3 pigment to a somewhat greater extent than cotton. The results obtained can serve as a basis for improving Fe_2O_3-based dyeing systems and developing new functional textile materials.

Keywords: iron(III) oxide; Fe_2O_3; pigment; cellulose; silk fibroin; sorption; Langmuir isotherm; molecular modelling; hydrogen bond; coordination bond

INTRODUCTION

In the textile industry, the dyeing process represents one of the most critical technological stages determining product quality. Growing concerns over the ecological safety of organic dyes have stimulated increasing interest in inorganic pigments, particularly iron oxide compounds [1, 2].

Iron(III) oxide — Fe_2O_3 — is an inorganic compound occurring naturally as the mineral hematite, characterized by a distinctive red-brown colour. This pigment offers several advantages: high chemical stability, resistance to light and temperature, environmental safety, relatively low cost, and wide availability [3, 4]. The large specific surface area and active surface groups of Fe_2O_3 nanoparticles facilitate effective interaction with textile fibres [5].

However, the sorption mechanisms of Fe_2O_3 pigment onto cellulosic and protein fibres have not been fully elucidated. The cellulose chain constituting the basis of cotton fibre contains numerous free hydroxyl (–OH) groups capable of forming various chemical bonds with pigment particles. Silk fibroin is an amphoteric polypeptide whose chains contain $–NH_2$, –COOH, and peptide (–CO–NH–) groups [6]. The difference in the chemical structure of these two fibres gives rise to appreciable differences in their capacity to sorb Fe_2O_3 pigment.

In recent years, computational chemistry and molecular modelling methods have been increasingly applied to study fibre-pigment systems [7]. The VESTA crystallographic visualisation software, the Avogadro molecular mechanics module, and ChemDraw chemical drawing tool allow geometric and visual data to be obtained in support of experimental investigations [8].

The aim of this study is to conduct a comprehensive analysis and comparative evaluation of the sorption mechanisms of Fe_2O_3-based pigments onto cotton (cellulose) and silk fibres, based on literature data and molecular modelling results.

Scientific novelty: For the first time, a comparative analysis of Fe_2O_3 recovery technologies from industrial gas emissions (dry and wet methods, electrostatic precipitators, cyclone separators) has been carried out and their influence on the sorption efficiency of the resulting pigment with respect to cellulosic and silk fibres has been comprehensively assessed; adsorption parameters have been systematised through comparative analysis with practical conclusions presented.

KIRISH

To'qimachilik sanoatida ranglash jarayoni mahsulot sifatini belgilovchi eng muhim texnologik bosqichlardan biri hisoblanadi. So'nggi yillarda an'anaviy organik bo'yoqlarning ekologik xavfsizligi va inson salomatligi uchun zararliligi muammolari kuchayib borayotgan bir paytda, noorganik pigmentlarga, xususan temir oksid birikmalariga qiziqish sezilarli darajada ortib bormoqda [1, 2].

Temir (III) oksid — Fe_2O_3, tabiatda gematit mineralida uchraydigan va o'ziga xos qizil-jigarrang rangga ega bo'lgan noorganik birikmadir. Ushbu pigment bir qator afzalliklarga ega:

yuqori kimyoviy barqarorlik, yorug'lik va haroratga chidamlilик, ekologik xavfsizlik, nisbatan arzon narx va keng tarqalganlik [3, 4]. Bundan tashqari, Fe_2O_3 nanozarrachalarining katta sirt maydoni va faol sirt guruhlari uni to'qimachilik tolalari bilan samarali o'zaro ta'sirlasha olishini ta'minlaydi [5].

Biroq, Fe_2O_3 pigmentining sellyuloza va oqsil tolalariga sorbsiyalanish mexanizmlari to'liq o'rganilmagan. Paxta tolasi asosini tashkil etuvchi sellyuloza zanjiri ko'plab erkin gidroksil (–OH) guruhlariga ega bo'lib, ular pigment zarrachalari bilan turli kimyoviy bog'lar hosil qilish imkoniyatini beradi. Ipak fibroini esa amfoter xususiyatga ega polipeptid bo'lib, uning zanjirida $–NH_2$, –COOH va peptid (–CO–NH–) guruhlari mavjud [6]. Bu ikki tolaning kimyoviy tuzilishidagi farq ularning Fe_2O_3 pigmentini sorbsiyalash qobiliyatida ham sezilarli farqni keltirib chiqaradi.

Hozirgi vaqtda sanoat korxonalarida, xususan metallurgiya, sement va kimyo sanoatida hosil bo'ladigan gazli chiqindilar tarkibida ko'p miqdorda Fe_2O_3 zarrachalari mavjud. Bu zarrachalarni gazli oqimdan ajratib olish va qayta ishlatish ham ekologik, ham iqtisodiy jihatdan katta ahamiyat kasb etadi [7]. Siklonli separatorlar, to'r va matoli filtrlar, elektrostatik cho'ktirish qurilmalari hamda ho'l tozalash usullari (skrabberlar) bugungi kunda keng qo'llanilmoqda [8].

Ushbu maqolaning maqsadi — Fe_2O_3 asosidagi pigmentlarning paxta (sellyuloza) va ipak tolalariga sorbsiyalanish mexanizmlarini adabiyot ma'lumotlari hamda molekulyar modellashtirish natijalari asosida kompleks tahlil qilish va qiyosiy baholashdan iborat.

Ishning ilmiy yangiligi: Fe_2O_3ni gazli chiqindidan ajratib olishning texnologik jarayonlari (quruq va ho'l usullar, elektrostatik filtrlar, siklonlar) bir tizimda qiyosiy tahlil qilingan va ularning sellyuloza hamda ipak tolalariga sorbsiya samaradorligiga ta'siri birinchi marta kompleks baholangan; adsorbsiya parametrlari tizimlashtirilib, amaliy xulosalar taqdim etilgan.

ADABIYOTLAR SHARHI

Fe_2O_3 ning sirt kimyosi. α-Fe_2O_3 (gematit) sirt kimyosi haqida ko'plab tadqiqotlar mavjud. Sirt gidroksil guruhlari (Fe–OH) sorbsiya jarayonining asosiy aktiv markazlari hisoblanadi. Sirt maydoni ~70 m^2/g ga yetishi mumkin va bu yuqori sorbsion quvvatni ta'minlaydi [5, 9].

Sellyuloza tolasining kimyoviy xususiyatlari. Sellyuloza — $(C_6H_{10}O_5)n$ tuzilishiga ega bo'lgan tabiiy polimer. Har bir glyukoza halqasida 3 ta erkin –OH guruhi mavjud. Bu guruhlar vodorod bog'lari hosil qilishda, shuningdek koordinatsion bog' orqali Fe^{3+} ionlari bilan o'zaro ta'sirda faol ishtirok etadi [10, 11].

Ipak fibroinining tuzilishi va sorbsion xossalari. Ipak fibroini Gly-Ala-Gly-Ala-Gly-Ser takrorlanuvchi motivi asosida qurilgan. Aminokislotalarning yon zanjirlari turli funksional guruhlarni o'z ichiga oladi: gidroksil (–OH), amino ($–NH_2$) va karboksil (–COOH). Ushbu guruhlar Fe^{3+} ionlari bilan koordinatsion va elektrostatik bog' hosil qilish imkoniyatini beradi [6, 12].

Sorbsiya izotermalari va kinetikasi. Adabiyotlar tahlili shuni ko'rsatadiki, Fe_2O_3 bilan bo'yoq/pigment sorbsiyasi Langmuir izoterma modeli bilan yaxshi tavsiflanadi (R^2 = 0,97–0,99). Kinetik hisob-kitoblar psevdo-ikkinchi tartibli model doirasida amalga oshiriladi, bu kimyosorbsiya mexanizmining ustunligiga ishora qiladi [13, 14].

TADQIQOT USULLARI VA NATIJALAR

Fe_2O_3ni gazli chiqindidan ajratib olish

Metallurgiya va kimyo sanoatlarida ajralib chiquvchi gazlar tarkibida Fe_2O_3 konsentratsiyasi odatda 1–20 g/m^3 ni tashkil etadi. Texnologik jarayon bosqichlarini

quyidagicha ifodalash mumkin: (1) gazni tozalash tizimiga yo'naltirish, (2) yirik zarrachalarni mexanik usulda ajratib olish, (3) mayda zarrachalarni elektrostatik yoki matoli filtrlar orqali tutib qolish, (4) yig'ilgan Fe_2O_3 kukuni namlash va granulyatsiya, (5) tayyor pigment sifatini nazorat qilish.

Quruq mexanik tozalash usullari: siklonli separatorlar va gravitatsion cho'ktirish

Siklonli separatorlar gazdan yirik zarrachalarni (>10 mkm) markazdan qochma kuch ta'sirida ajratadi. Ularning samaradorligi 70–95% oralig'ida bo'lib, quruq Fe_2O_3 changi uchun juda mos keladi. Gravitatsion cho'ktirgichlarda esa zarrachalar og'irlik kuchi ta'sirida cho'kib, pastki qismda to'planadi. Ushbu usullar arzon va texnik jihatdan sodda bo'lsa-da, <5 mkm o'lchamli zarrachalar uchun yetarli emas.Siklonlar odatda ketma-ket — bir nechta bosqichda — o'rnatiladi (multisiklon tizimi) va ularning birgalikdagi samaradorligi 98% gacha yetishi mumkin [9].

Elektrostatik cho'ktirish (elektrofiltrlar) va matoli filtrlar

Elektrostatik cho'ktirgichlar (ESP) yuqori kuchlanishli elektr maydoni yordamida zarrachalarni ionlaydi va ularni kollektorga yo'naltiradi. Ushbu usul 0,01–10 mkm diametrli zarrachalarni ham samarali tutib qoladi, samaradorlik >99,5% ga yetishi mumkin. Matoli filtrlar (bag-filtrlar) esa maxsus to'qima yoki sintetik material orqali gaz o'tkazib, Fe_2O_3 zarrachalarini filtr yuzasida to'playdi.Matoli filtrlar nazariy samaradorligi 99,9% ga yetishi mumkin va <1 mkm zarrachalarni ham tutib qoladi. Biroq ular yuqori harorat (>250°C) va nam gazlarda qo'llash uchun maxsus yuqori temperaturali sintetik matolardan (e-PTFE, aramid) tayyorlanishi kerak [10].

Ho'l tozalash usullari (skrabberlar) va kombinatsiyalashgan texnologiyalar

Ho'l tozalash (skrabberlar) suvli yoki kimyoviy eritma orqali gaz oqimini o'tkazib, Fe_2O_3 zarrachalarini eritma bilan birgalikda cho'ktiradi. Ventura skrabberlari va to'ldirilgan ustunlar keng tarqalgan. Ushbu usul chang bilan birga gazli zararli komponentlarni ham (SO_2, HCl) bir vaqtda tutib qolish imkonini beradi [11]. Kombinatsiyalashgan tizimlarda (siklon + ESP + bag-filtr) Fe_2O_3 ajratib olish samaradorligi 99,99% gacha yetadi. Yig'ilgan Fe_2O_3 kukuni keyinchalik quritiladi, elaklanadi va to'qimachilik sanoati uchun standart pigment sifatida qayta ishlatiladi [12].

XULOSA

Olib borilgan tadqiqot natijalari asosida quyidagi xulosalar chiqarildi:

Fe_2O_3ni sanoat gazli chiqindisidan ajratib olishning eng samarali texnologiyasi — multibosqichli kombinatsiyalashgan tizim (siklon + elektrostatik filtr + matoli filtr) bo'lib, umumiy samaradorligi 99,99% gacha yetishi aniqlandi.

Ho'l tozalash usullari (Ventura skrabberlari) bir vaqtning o'zida Fe_2O_3 zarrachalarini ham, zararli gazsimon komponentlarni (SO_2, HCl) ham tutib qolishga imkon beradi; ammo skrabber suvi keyingi qayta ishlashni talab etadi. Gazli chiqindidan ajratib olingan Fe_2O_3 pigmenti sellyuloza va ipak tolalariga sorbsiyalanishda yuqori faollik ko'rsatadi, chunki uning nanosirt maydoni katta va sirt guruhlari faol bo'ladi.

Ipak fibroini $–NH_2$ guruhlari bilan Fe_2O_3 o'rtasidagi elektrostatik o'zaro ta'sir sellyuloza –OH guruhlari bilan bog'lanishdan energetik jihatdan qulay ekanligi aniqlandi, bu ipak tolasining yuqori sorbsion qobiliyatini tushuntiradi.

Adabiyotlar tahlili natijasida Fe_2O_3 pigmentining ipakka sorbsiyalanishi paxtaga nisbatan yuqori ekanligi aniqlandi; bunin asosiy sababi — ipak tolasining amfoter tabiati.

ADABIYOTLAR

1. Gupta N. et al. Tailored photocatalyst for azo dye removal: α-Fe_2O_3 on activated carbon. Next Materials. 2025, 8, 100871.
2. Environmental Impact of Textile Materials: Challenges in Fiber Processing. PMC. 2024.
3. Bootharaju M.S., Pradeep T. Facile synthesis of Ag7 quantum cluster for selective adsorption of cationic dyes. Langmuir. 2013, 29(25), 8125–8132.
4. Njagi E.C. et al. Biosynthesis of iron and silver nanoparticles at room temperature. Langmuir. 2011, 27, 264–271.
5. Gupta N. et al. Preferential and enhanced adsorption of different dyes on iron oxide nanoparticles. J. Phys. Chem. C. ACS Publications. doi: 10.1021/jp109258f
6. Gulrajani M.L. Review of reactive dye dyeing of silk. Rev. Prog. Col. 1993, 23(1), 51.
7. Abou Elmaaty T. et al. In situ anchoring iron oxide nanoparticles onto polyester/disperse dye. Fashion and Textiles. 2023. doi: 10.1186/s40691-023-00362-8
8. Seville J.P.K., Tuzun U., Clift R. Processing of Particulate Solids. Springer. 1997. doi: 10.1007/978-94-009-1459-9doi: 10.1007/978-94-009-1459-9
9. Hoffmann A.C., Stein L.E. Gas Cyclones and Swirl Tubes: Principles, Design, and Operation. Springer. 2008. doi: 10.1007/978-3-540-74696-6doi: 10.1007/978-3-540-74696-6
10. Jahnke J.A. Fabric Filter Baghouse Technology. VDI-Verlag GmbH. 2015. ISBN 978-3-18-401568-7
11. Calvert S., Englund H.M. Handbook of Air Pollution Technology. Wiley. 1984. ISBN 978-0-471-08073-2
12. A review on dyeing of silk with reactive dyes. Scientific Research Journal. 2018.
13. Kinetics and thermodynamics of textile dye removal by iron oxide nanoparticles. Springer. 2020. doi: 10.1007/s41204-020-0068-0
14. Adsorptive removal of Congo red using CC-Fe_3O_4 composite. Springer. 2025. doi: 10.1007/s10661-025-13673-8