

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI**

**ALISHER NAVOIY NOMIDAGI
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

FIZIKA FAKULTETI

FIZIKA YO'NALISHI

“OPTIKA VA SPEKTROSKOPIYA” KAFEDRASI

BOZORBOYEV MALIK

**NITROMETAN VA UNING TURLI XIL ERITMALARIDA
MOLEKULALARARO TA'SIR KUCHLARINI KOMBINATSION
SOCHILISH SPEKTRLARI HAMDA KVANTO-KIMYOVIY
HISOBLASHLAR YORDAMIDA O'RGANISH**

MALAKAVIY BITIRUV ISHI

**Ish tekshirildi va himoyaga ruxsat berildi.
«Optika va spektroskopiya» kafedrası
mudiri f.-m.f.d., prof. Jumabaev A.**

«____» _____ 2013 y.

**Ilmiy rahbar:
f.-m.f.d., professor
Jumabayev A.**

«____» _____ 2013 y.

MUNDARIJA

Kirish	3
 I. BOB. NAZARIY QISM	
1. §. Yorug'likning muhitlar bilan o'zaro ta'siri. Yorug'likning kombinatsion sochilishi.....	5
2. §. Molekulalararo ta'sir kuchlari va ularning hosil bo'lishi.....	13
3. §. Kvanto – kimyoviy nazariy hisoblashlarning tasnifi	18
4. §. Molekulalararo vodorod bog'lanish va ularning spektral namoyon bo'lishi.....	20
 II. BOB. AMALIY QISM	
1. §. Tanlab olingan moddaning xususiyatlari	27
2. §. Tajriba qurilmasi va uning ishlash prinsipi.....	30
3. §. Nazariy hisoblashlarni baholash.....	35
 III. BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI	
1. §. Nitrometan tebranish polosasining kombinatsion sochilish spektrlari va kvanto-kimyoviy hisoblashlar.....	36
Xulosa.....	41
Adabiyotlar.....	42

KIRISH

Moddaning suyuq holati nazariyasini rivojlantirish – fanning fundamental massalaridan biridir. Toza suyuqliklar va ularning eritmalarini amaliyotda qo'llanilishi tufayli, ularning xossalari chuqur o'rganish zaruriyati paydo bo'ladi. Tabiat to'g'risidagi bilimlarimizni yanada boyitishda suyuq, muhitlar to'g'risidagi nazariyada bir qancha yechilishi lozim bo'lgan masalalar paydo bo'lmoqda. Shuning uchun suyuqliklarning molekulyar tuzilishi va fizik-ximik xossalari bilan bog'liq savollarni kompleks o'rganish masalasi bugungi kunda ham zarur va dolzarbdir.

Oxirgi yillarda suyuqliklarning statistik nazariyasini yaratishda bir qancha yutuqlarga erishganligiga qaramasdan, ko'plab qiyinchiliklarga duch kelinmoqda. Suyuqliklarning amaliyotda keng qo'llanilishi va ularning kimyo, biologiya va fizikaning bir qancha sohalarida ishlatilishi sababli suyuq, muhitning tuzilishi va xossalari bilishga bo'lgan talab kuchayib bormoqda, buning natijasida esa suyuqliklar nazariyasini yanada rivojlantirish talab qilinmoqda. Molekulalararo o'zaro ta'sir va u bilan bog'liq bo'lgan agregatlarning hosil bo'lishi, moddaning suyuq holatiga tegishli bo'lgan hamda bugungi kunga uncha to'liq yechimini topmagan muammolardan biridir. Molekulalararo vodorod bog'lanish va u tufayli hosil bo'lgan agregatlarning spektral namoyon bo'lishi yetarlicha o'rganilgan, ammo ushbu o'zaro ta'sirlashuv sababli hosil bo'lgan agregatlarning boshqa turlari mavjud bo'lishiga qaramasdan ularning spektral namoyon bo'lishi yetarlicha o'rganilmagan.

Bitiruv ishining maqsadi — Nitrometan va uning tiofen bilan eritmasi molekulalararo ta'sir kuchlarini KS spektrlari hamda kvanto-kimyoviy hisoblashlar yordamida o'rganishdan iboratdir.

Molekulalararo o'zaro ta'sir tabiatini o'rganish zamonaviy molekulyar fizikaning asosiy tushunchalaridan biridir. Moddalarning asosiy xususiyatlarini va fizik tabiatini o'rganishda molekulalararo ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirlarning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli xil optik usullar

qo'llaniladi. Moddalarning xossalari uning qanday molekulalardan tuzilganligiga va bu molekulalar o'zaro qanday joylashganligiga bog'liq. Fizika, kimyo va biologiyadagi ko'pgina fundamental masalalarni hal qilishda moddada molekulalarning miqdorini, ularning tuzilishini va boshqa xossalarini keng temperatura, bosim va konsentrasiya intervalida hamda turli agregat holatlarda bilish talab etiladi.

I. BOB. NAZARIY QISM

1. §. Yorug'likning muhitlar bilan o'zaro ta'siri. Yorug'likning kombinatsion sochilishi

Muhitga tushgan yorug'lik qaytish, sinish va yutilishdan tashqari sochiladi ham. Yorug'lik maydoni ta'sirida tebranayotgan elektronlarning majburiy tebranishlari tufayli paydo bo'ladigan ikkilamchi to'lqinlar yorug'lik to'lqini olib kelayotgan energiyaning bir qismini chetga sochib yuboradi. Boshqacha qilib aytganda moddadan yorug'lik tarqalayotganda yorug'lik sochilishi kerak. Bunday hodisa yuz berishi uchun yorug'lik to'lqinining o'zgaruvchi maydoni ta'siri ostida tebrana oladigan elektronlarning bo'lishi etarlidir [1].

Reley sochilishida sochilgan yorug'lik chastotasi tushuvchi yorug'lik chastotasiga mos keladi. Sochilishning bunday turining birinchi bo'lib Reley aniqlagani uchun bunday sochilish **Reley** sochilish deb yuritiladi. Bu sochilish kogerent tarzda yuz beradi. Shu sababli ham **Reley** sochilishi-yorug'likning kogerent sochilishidir (1-rasm, a). Biroq sinchiklab o'tkazilgan tekshirishning ko'rsatishicha (Raman, G.S.Landsberg va L.I. Mandelshtam, 1928 yil), sochilgan yorug'lik spektrida tushayotgan yorug'likni xarakterlaydigan chiziqlardan tashqari qo'shimcha chiziqlar (yo'ldoshlar) borligi, bular tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida turishi ma'lum bo'ldi (1-rasm).

Yo'ldoshlar tushayotgan yorug'likning har qanday spektral chizig'i yonida kelgani uchun, bu yo'ldoshlarni qanday sharoitda payqash mumkin, degan savol tug'iladi. Yo'ldoshlar ko'rinadigan bo'lishi uchun tushayotgan yorug'lik spektri tutash spektr bo'lmay, balki alohida chiziqlar (monoxromatik chiziqlar) to'plamidan iborat bo'lishi kerak. Bu hodisaning quyidagi qonunlari tajribadan topilgan [1-8].

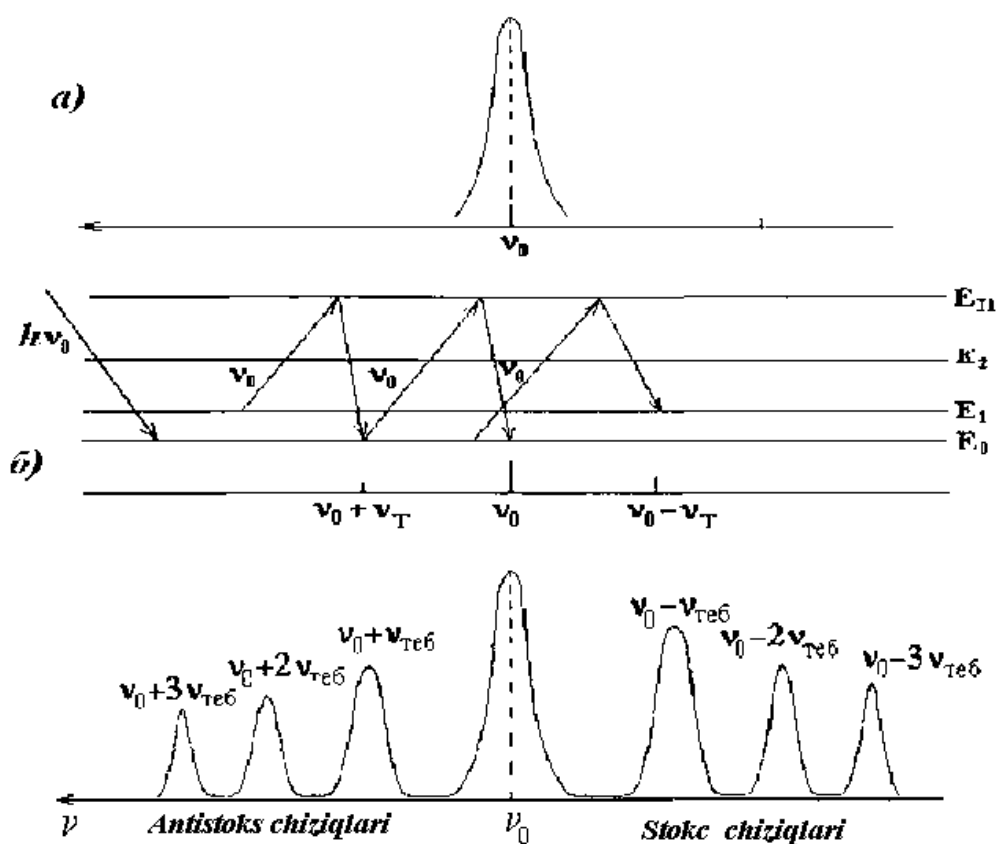
- 1) Yo'ldoshlar tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida bo'ladi.

2) Uyg'otuvchi (tushayotgan) yorug'lik spektral chizig'ining ν_0 chastotasi bilan yo'ldoshlardan har bir chiziqlarning $\nu', \nu'', \nu''' \dots$ chastotalari orasidagi $\Delta\nu$ farq sochuvchi modda uchun xarakterli bo'lib, uning molekulalarining xususiy tebranishlari chastotalariga (ν^i) teng:

$$\Delta\nu_1 = \nu_0 - \nu' = \nu_1^i, \quad \Delta\nu_2 = \nu_0 - \nu'' = \nu_2^i, \quad \Delta\nu_3 = \nu_0 - \nu''' = \nu_3^i, \dots$$

3) Yo'ldoshlar uyg'otuvchi chiziqdan ikki tomonda simmetrik yotuvchi chiziqlarning ikki sistemasidan iborat, (1-rasm) ya'ni

$$\nu_0 - \nu_r = \nu_\nu - \nu_0.$$



1 - rasm. O'yg'otuvchi manbaning (a) va kombinatsion sochilish spektrining (b) sxematik ko'rinishi. ($E_0, E_1 \dots$ energetik holatlar).

Bu yerda ν_r chastota uyg'otuvchi chastotalardan uzunroq to'liqlik tomonda joylashgan yo'ldoshlarning chastotalarini, ν_ν chastota esa uyg'otuvchi chastotalardan ikkinchi tomonda yotgan yo'ldoshlarning chastotalarini bildiradi. Spektrning qizil qismiga yaqin joylashgan va shuning uchun «qizil» yo'ldoshlar

deb ataladigan birinchi yoʻldoshlar «binafsha» yoʻldoshlardan ancha intensivdir (1-rasm).

4) Temperatura koʻtarilganda «binafsha» yoʻldoshlarning intensivligi tez ortadi.

Kombinatsion sochilishni birinchi boʻlib **G.S.Landsberg** va **L.I. Mandelshtamlar** hamda Hind olimlari Raman va Krishnanlar kashf etishgan. Hind olimlari Nobel mukofotiga sazovor boʻlishgan [5].

Yorugʻlikni kombinatsion sochilishining mumtoz nazariyasi

Kombinasion sochilish hodisasi klassik nazariya nuqtai nazaridan quyidagicha tushuntiriladi. Ushbu hodisada yoʻldoshlarning paydo boʻlish sabablari yorugʻlik toʻlqinini sochuvchi muhit molekulasida atomlarining past chastotali tebranishlari bilan modulyatsiyalanishi orqali tushuntirish mumkin. Molekulaning qutublanishi, umuman qaraganda uni tashkil qilgan atomlarning joylashishiga bogʻliq [2-5]. Atomlar tebranganda qutublanish α_0 - oʻrtacha qiymat atrofida shu tebranishdini buni quyidagicha izohlash mumkin:

$$\alpha(t) = \alpha_0 + F(t)$$

Ushbu tebranishlarning chastotasi 10^{12} - 10^{13} gs boʻlib, elektromagnit toʻlqin shkalasining infraqizil spektri sohasiga toʻgʻri keladi. Boshqacha aytganda, kattalikni oʻzgarishi tushayotgan yorugʻlikning ($\approx 10^{15}$ Gs) elektr maydonning tebranishiga nisbatan sekinroq oʻzgaradi. Shu sababga koʻra ham tushayotgan yorugʻlik toʻlqining monoxromatik maydonida **molekulaning dipol** momentini oʻzgarishi

$$p(t) = \alpha \cdot E = [\alpha_0 + F(t)]E_0 \cos \omega t$$

qonun boʻyicha roʻy beradi, yaʼni amplitudasi modulyatsiyalangan tebranishdan iborat boʻladi. Bu yerda $E = E_0 \cos \omega t$ -yorugʻlik toʻlqinining oʻzgaruvchan elektr maydoni, E_0 yorugʻlik toʻlqini elektr maydoni kuchlanganligini amplitudasi, $\omega = 2\pi\nu$ - tushayotgan yorugʻlikning burchak chastotasi, α - molekulaning

qutublanuvchanligi, faqat uning tuzilishi va xossasiga bog'liq bo'lgan doimiy [4-8].

Bu jarayonda sochilgan yorug'lik maydon kuchlanganligining tebranishi ham modulyatsiyalanadi. Bu tebranishlarning eltuvchi chastotasi tushayotgan yorug'lik to'lqining chastotasi ω ga teng, modulyatsiya esa ω_i - chastotalarda (sochuvchi modda molekulasiidagi atomlarning tebranish chastotasi) yuz beradi. Amplitudasi modulyatsiyalangan bunday tebranishlarning spektri ω - chastotali eltuvchi chastota bilan bir qatorda $\omega \pm \omega_i$, chastotaga ega bo'lgan kombinatsion tebranishlar hosil bo'ladi. Boshqa so'z bilan aytganda sochilgan yorug'likning spektri shu molekula haqida axborot beradi. Bu spektrni o'rganish va taxlil etish orqali molekula strukturasini va tuzilishini bilishga muvaffaq bo'lamiz [1-4].

Klassik elektrodinamika qonuniga binoan, $\omega = 2\pi\nu$ chastotada tebranayotgan dipol intensivligi

$$I_\nu = \frac{16\pi^4\nu^4}{3c^2} \alpha^2 E_0^2$$

ga teng bo'lgan monoxromatik nur chiqaradi.

$\alpha \neq const$ hol uchun, ya'ni sochuvchi muhit molekulasiining qutublanuvchanligi o'zgaruvchan bo'lsa u holda molekulaning dipol momenti ham vaqt bo'yicha o'zgaradi. Umuman, molekula qutublanuvchanligi yadro tebranishini dipol tebranishlarida ishtirok etishi sababi bilan ham o'zgarib turishi kerak. Elektronlar bilan yadroni o'zaro bog'langanligi sababli majburiy ν chastotada tebranayotgan elektronlar yadroning ham tebranishini yuzaga keltiradi. Biroq yadroning massasi elektronning massasiga nisbatan nihoyatda katta (**1836 marta**) bo'lgani uchun yadroning tebranishi juda ham kuchsiz bo'ladi. Bu esa molekulaning qutblanishini o'zgarishiga olib keladi. Natijada sochilgan yorug'likni chastotasi o'zgaradi va siljish nokogerent bo'lib qoladi.

Shunday qilib, klassik elektrodinamika sochilgan yorug'lik spektrida siljimagan chiziqning (ν) har ikki tomonida ν_i masofaga simmetrik siljigan chiziqlar – yo'ldoshlarni paydo bo'lishini to'g'ri tushuntirib beradi va ularning intensivligi

$$I_{s,A} = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_R^{S,A})^4 \alpha^4 E_0^2 = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_0 \mp \nu_i)^4 \alpha^4 E_0^2$$

formula bilan hisoblanadi. Bunda $\nu_R^{S,A}$ - **Raman** chastotasi (stoks va antistoks chiziqlari uchun).

Mumtoz elektrodinamika nuqtai nazaridan stoks va antistoks chiziqlarining intensivligi teng ekanligi kelib chiqadi. Eksperiment natijalaridan yaxshi bilamizki, ushbu chiziqlarning (yoʻldoshlarning) intensivligi teng emas, jumladan qizil yoʻldoshlar-stoks chiziqlarining intensivligi binafsha yoʻldoshlarning intensivligidan yuqori ekanligini koʻrsatadi. Klassik fizika qizil va binafsha yoʻldoshlarning intensivliklari orasidagi ushbu miqdoriy farqni tushuntirib bera olmadi. Yorugʻlikning kombinatsion sochilishdagi intensivliklarning miqdoriy muammosini faqat kvant tasavvurlari asosida toʻgʻri tushuntirish mumkin [1-8].

Yorugʻlikni kombinatsion sochilishini kvant nazariyasi

Yorugʻlik kvantlari toʻgʻrisidagi soddalashtirilgan tasavvurdan foydalanib, kombinatsion sochilish hodisasining mohiyatini anglab yetish mumkin. Kvant tasavvurlariga asosan, ν_0 chastotali yorugʻlik maʼlum bir ulushlar (kvantlar) tarzida tarqalib, bularning miqdori $h\nu_0$ ga teng bu yerda $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J·s - Plank taklif etgan universal doimiydir. Shuning uchun oʻzida ν_0 chastotali tebranishlar boʻlayotgan atom $h\nu_0$ energiya zahirasi ega boʻladi. Bu energiyani atom oʻshanday chastotali yorugʻlik tarzida chiqarishi mumkin. Bu nuqtai nazardan yorugʻlikning molekulalarda sochilishini yorugʻlik kvantlarining (yaʼni fotonlarning) molekulalar bilan toʻqnashishi deb qarash mumkin, bu toʻqnashish natijasida fotonlar uchish yoʻnalishini oʻzgartiradi, yaʼni chetga sochiladi. Fotonlar bilan molekulalar oʻrtasidagi toʻqnashishlar **elastik** boʻlishi ham, **no elastik** boʻlmasligi ham mumkin. Toʻqnashish elastik toʻqnashish boʻlgan holda molekulaning energiyasi va fotonning ν_0 chastotasi oʻzgarmaydi, bu hol Reley sochilishiga mos keladi (1-rasm). **Releycha** sochilish paytida sochilgan yorugʻlik

kvantlarining chastotasi muhitga tushayotgan yorug'lik kvantlarining chastotalariga mos keladi. Shuning uchun ham Releycha sochilishga **elastik** sochilish ham deyiladi [2-6].

To'qnashish elastik bo'lmagan holda fotonning energiyasi $h\nu_i$ tebranma kvant miqdorida ortadi yoki kamayadi. Agar yorug'lik tebranish holatida bo'lmagan molekula bilan o'zaro ta'sir qilishsa, yorug'lik molekulaga energiyasining tegishli qismini berib, $h\nu' = h\nu_0 - h\nu_i$ yoki $\nu' = \nu_0 - \nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda kichik chastotali nurga (qizil yo'ldosh, Stoks chizig'iga) aylanadi, bu yerda ν_0 o'yg'otuvchi yorug'lik chastotasi, ν_i molekula tebranishlarining chastotasi.

Agar yorug'lik tebranish holatida turgan molekulaga, ya'ni $h\nu_i$ - energiyaga ega bo'lgan molekulaga ta'sir qilsa, u holda yorug'lik molekuladan bu energiyani tortib olib, $h\nu' = h\nu_0 + h\nu_i$ yoki $\nu' = \nu_0 + \nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda katta chastotali nurga (Binafsha yo'ldosh, antistoks chizig'iga) aylanadi. Buni 1-rasmdan osongina tushinish mumkin. Yuqorida aytilganlardan kelib chiqib kombinatsion sochilishga quydagicha ta'rif berish mumkin: Sochilgan yorug'likning chastotasi tushayotgan yorug'likning chastotasi ν_0 bilan molekulalar ichida bo'ladigan tebranishlar chastotasining ν_i kombinatsiyasidan tarkib topadi. Shuning uchun bu sochilish kombinatsion sochilish deb ataladi [1-8].

Tebranish holatida bo'lgan molekulalar soni uyg'otilmagan molekulalar sonidan ancha kam bo'ladi, shuning uchun binafsha yo'ldoshning intensivligi qizil yo'ldosh intensivligidan beqiyos darajada kam bo'lishi kerak; tajribada ham xuddi shunday bo'ladi. Temperatura ko'tarilgan sari uyg'otilgan molekulalar soni tez ko'payadi, shunga yarasha binafsha yo'ldoshlarning intensivligi tez ortishi kerak; bu ham tajribada tasdiqlanmoqda. Stoks va antistoks chiziqlarining intensivligi temperaturaga bog'liq. Misol uchun stoks chiziqlarining ikki xil temperaturada intensivliklarining qiymati quyidagi nisbatda bo'ladi:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT_2}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT_1}}\right)}$$

Stoks chiziqlarining intensivligi temperaturaga teskari proporsional bo'lardi. Antistoks chiziqlariniki esa temperaturaga to'g'ri proporsional bo'ladi:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{e^{-\frac{h\nu}{KT_1}}}{e^{-\frac{h\nu}{KT_2}}}$$

Stoks va antistoks chiziqlarining intensivliklari nisbati

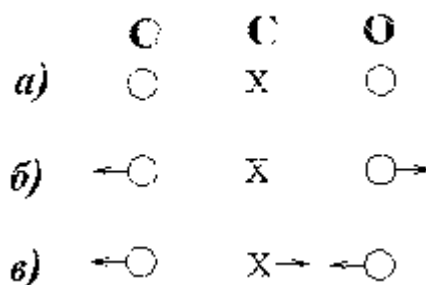
$$\frac{I_{ac}}{I_c} \approx \left(\frac{\nu_0 + \nu_{teb}}{\nu_0 - \nu_{teb}} \right)^4$$

bundan ko'rinadiki chastotaning turtinchi darajasiga proporsional ekan.

Haqiqatda, ν chastotali kombinatsion chiziqning intensivligi molekulaning bu chastotaga mos keladigan tebranishlar qilishida molekulaning α **qutblanuvchanligi naqadar ko'p o'zgarishi** bilan aniqlanadi. Qutblanuvchanlikning o'zgarishi bilan elektr momentining o'zgarishi turli xil tebranishlarda turlicha ifodalanishi mumkin.

Ba'zi tebranishlar **infraqizil** spektrida, aktiv bo'lsa, boshqasi **kombinatsion sochilish** spektrida aktiv bo'ladi.

Masalan: CO₂ molekulasida atomlar tebranganda (2-rasm, b) ularning joylashishi shunday o'zgaradiki, bunda molekulaning qutblanuvchanligi ko'p o'zgarib, uning elektr momenti o'zgarmaydi, chunki kislorodning bir xil ishorali zaryadlangan ikki atomi tebranish vaqtida uglerod zaryadidan ikki tarafga simmetrik joylashganicha qolaveradi.



2-rasm. CO₂ molekulasida atomlar tebranishining xillari. a – atomlarning dastlabki vaziyati; b – qutblanuvchanlikni o‘zgartiradigan tebranish; v - elektr momentini o‘zgartiradigan tebranishi.

Boshqacha tebranishda (2-rasm, a) qutblanuvchanlik o‘zgarmaydi, chunki kislorod atomlaridan biri uglerodga yaqinlashganda ikkinchisi uzoqlashadi va aksincha; biroq bu tebranishlarda molekulaning elektr momenti o‘zgaradi.

Shuning uchun birinchi tur tebranishda (2-rasm, b) kombinatsion sochilish chizig‘i paydo bo‘ladi, bu chiziqning chastotasini kombinatsion sochilish spektridan aniqlash mumkin; ikkinchi tur tebranishda (2-rasm, v) chastotani infraqizil yutilish polosasining vaziyatiga qarab topish mumkin.

Kombinatsion sochilish metodi moddaning molekulyar tuzilishini tadqiq etishning muhim metodi hisoblanadi. Molekula tebranishlarining xususiy chastotalari bu usul yordamida osongina aniqlanadi; bu usul molekula simmetriyasining xarakteri, molekulalar ichida ta’sir qiladigan kuchlarning kattaligi va umuman molekulyar dinamikaning o‘ziga xos tomonlari to‘g‘risida fikr yuritishga imkon beradi.

Ko‘p hollarda bu usul infraqizil yutilish metodi bilan birga qo‘shib o‘rganilib, molekulani to‘liq tadqiq etish imkonini beradi. Kombinatsion sochilish spektrlari molekulalar uchun shunchalik harakterlidirki, bu spektrlar yordamida murakkab molekulyar aralashmalarni, ayniqsa kimyoviy yo‘l bilan analiz qilish qiyin yoki hatto analiz qilib bo‘lmaydigan organik molekulalar aralashmalarini analiz qilish mumkin. Masalan: uglevodorodlarning juda murakkab aralashmasi bo‘lgan benzinlarning tarkibi kombinatsion sochilish metodi yordamida samarali ravishda analiz qilinadi [6-8].

Yuqorida gap dastlabki nurlanishning muhit molekulalari bilan o‘zaro ta’sir qilishda paydo bo‘ladigan kombinatsion sochilish to‘g‘risida bordi. Yorug‘likni atom yoki ionlar sochib yuborganda ham shunga o‘xshash hodisa yuz beradi. Masalaning mohiyatiga tushunib yetish uchun atom holidagi gazlarda yorug‘likning yutilishi va dispersiyasini o‘rganish natijalarini esga olish kerak bo‘ladi. Atomni ossillyatorlar to‘plami deb qarash mumkin; bu ossillyatorlarning xususiy chastotalari atomning ixtiyoriy ikki kvant holatidagi energiyalari ayirmasi bilan aniqlanadi. Shuning uchun atomlar bilan molekulalar o‘rtasidagi farq faqat ossillyatorlar tabiatida bo‘ladi: molekula bo‘lgan holda ossillyatorlar yadrolar harakatini tavsiflaydi, atomlar holida esa ossillyatorlar elektronlar harakatini tavsiflaydi. Bu o‘xshashlikni nazarda tutib, yuqorida yuritilgan mulohazalarni klassik modulyatsion manzara nuqtai nazaridan ham soddalashtirilgan kvant sxema nuqtai nazaridan ham endi atomlarga nisbatan takrorlash mumkin [7].

Fotonlarning elastik bo‘lmagan sochilishi ularning atomlar bilan qiladigan o‘zaro ta’siriga asoslanib nazariy ravishda oldindan aytilgan edi (**A.Smekal 1923 yil**). Biroq bu hodisa tajribada molekulyar kombinatsion sochilishdan ancha keyin topildi. Ionlarning kombinatsion sochish hodisasi 1963 yilda, atomlarning kombinatsion sochilish hodisasi 1967 yilda topildi.

Yorug‘likning kombinatsion sochilishi hodisasini klassik fizika doirasida turib tushuntirib berish mumkin, lekin uning kvant talqini yorug‘likni kvant tabiatini mohiyatan tasdiqlaydi [8].

Molekulalar strukturasini, ichki molekulalar va malekulalar aro kuchlarini o‘rganishda, murakkab aralashmalarni taxlil qilish va u yoki bu birikmalarni endentifikatsiyalash (ajratish) da kombinatsion sochilish usuli muhim anjomdir.

2. §. Molekulalararo ta’sir kuchlari va ularning hosil bo‘lishi

Ma’lumki, kimyoviy jihatdan valentliklari to‘yingan va elektroneytral molekulalar bir-biriga yaqin kelganda, o‘zaro tortishadi. Demak, molekulalarni

bir-biriga tortib turadigan molekulalararo kuch mavjud ekan. Bu kuch ta'sirida gazlar suyuqlikka aylanadi, molekulalar bir-biriga tortilib, mustahkam kristall hosil qiladi, bir molekula ikkinchi molekula yuzasiga tortilib, adsorbiylanadi, bir xil molekulalar birlashib assosilanadi va x.a. kazo. Molekulalararo kuch Vander-Vals tenglamasida e'tiborga olingan va a/v^2 ga teng. Shu sababdan, molekulalararo kuch Van-der-Vals kuchi deb ataladi. Uzoq vaqtgacha Van-der-Vals kuchining tabiati noma'lum bo'lib keldi, keyingi vaqtdagina bu kuchning tabiati oydinlashtirildi. Bu kuch ham atomlararo kuch singari, elektr tabiatiga ega ekanligi aniqlandi. Molekulalararo kuch, asosan, uch xil kuchdan (effektdan) — oriyentasion, induksion va dispersiion kuchlardan iborat. Endi bu kuchlar ustida qisqacha to'xtalib o'tamiz [9-13].

Oriyentasion kuch. Bu kuch qutblangan molekulalar orasida vujudga keladi. Qutblangan molekulalar bir-biriga nisbatan ma'lum tartib bilan joylashadi. Ularning qarama-qarshi ishorali qutblari biri qutblangan molekulalar biriga yaqinlashgan bazi- dipollarining joylanishi. yatta urnashadi. Natijada qarama-qarshi ishorali qutblar elektrostatik kuch (kulon kuchi) bilan bir-biriga tortiladi. Dipollar orasidagi bunday kuch oriyentasion effekt (kuch) deb ataladi. Kizomi Van-der-Vaals kuchi oriyentasion effektdan iborat, deb faraz qilgan edi. Shu sababdan, bu kuch Kizomi kuchi deb xam ataladi. Oriyentasion kuchning energiyasi

$$U_0 = - \frac{2 \mu_1^2 \mu_2^2}{3 k T r^6} \quad (1)$$

bu yerda: μ_1 va μ_2 — bir-biriga ta'sir etayotgan molekulalarning tug'ma dipol momenti; k — Bolsman konstantasi; r — molekulalar orasidagi masofa, T — absolyut temperature [9].

Issiqlik ta'siridagi harakat qutblangan molekulalarning tartibli joylashishiga to'sqinlik qilganligidan, oriyentasion kuch temperaturaga teskari proporsional bo'ladi. Tenglama oldidagi minus (—) ishorasi ta'sir energiyasi tortirish energiyasi ekanligini ko'rsatadi (itirish energiyasi plyus «+» ishorasi bilan

ifodalanadi). Qutblangan molekullarda molekullararo tortishuv kuchli bo'lganligidan, molekullararo tortishuv kuchi kam bo'lgan qutblanmagan molekullarga nisbatan yuqori temperaturada suyuqlanadi va qaynaydi.

Induksion kuch. Bu kuchni Debay kashf etgan. Bir-biriga yaqin kelgan molekullarning biri qutblangan, ikkinchisi qutblanmagan (tug'ma dipoli bo'lmagan) molekula deb faraz qilaylik. Bu vaqtda tug'ma dipolsiz molekula tug'ma dipolli molekula ta'sirida qutblanadi. Natijada ikkinchi molekulada induksion dipol vujudga keladi va tug'ma dipol bilan induksion dipol tortishadi. Shunday qilib, bu molekullar bir-birini tortadi. Bu tortishish kuchi *induksion kuch* deyiladi. Uning energiyasi qutbli molekulaning tug'ma dipoli (s) ga va tug'a dipoli bo'lmagan molekulaning qutblanuvchanligi (a) ga proporsional bo'ladi:

$$U_U = - \frac{\alpha \mu^2}{r^6} \quad (2)$$

Dispersion kuch. Tug'ma dipoli bo'lmagan molekullar ham bir-biri bilan tortishadi, aks holda, ular suyuqlikka aylanmasligi kerak edi. Bunday molekullar orasida orientasion va induksion tortishish kuchlari bo'lishi mumkin emas. Ular dispersion kuch bilan tortishib turadi [12-13].

Dispersion kuchning tabiati sxema ravishda quyidagicha tushuntiriladi. Bu kuchning vujudga kelishiga asosiy sabab, elektronlar yadro atrofida ayrim vaqtlarda (bir onda) notekis taqsimlanishidir. Masalan, vodorod atomini olsak, uning yagona elektroni yadroning goh bir tomonida, goh ikkinchi tomonida bo'lishi mumkin. Natijada bir onli dipol vujudga keladi. Shuning uchun elektrik simmetrik molekullarda (vodorod atomining) o'rtacha bir onli dipol momenti nolga teng bo'lsada, bir onli dipol qo'shni molekullarga ta'sir qilib uni induksiyalaydi. Masalan, argon atomi yadrosi atrofida 18 ta elektron aylanib yuradi. Bir paytda bu elektronlarning yarmi yadroning bir tomonida, yarmi ikkinchi tomonda aylanib yurishi ehtimoldan uzoq. shuning uchun argonning bir onli dipol momenti nolga teng bo'lishi mumkin emas. Shunday qilib, argon dipol momentining qiymati va yo'nalishi har onda turlicha bo'ladi. Lekin elektronlarning

uzoq vaqt mobaynida yadroning turli tomonlarida guruhlanish ehtimolligi o'zaro tengdir. Shusha ko'ra, argonning dipol momenti nolga teng deyiladi. Tajribada ana shu o'rtacha dipol o'lchanadi [9-13].

Atom yoki molekulalarda ma'lum vaqtda vujudga keladigan dipol moment *fluktasion dipol momenti* deyiladi. Yuqorida keltirilgan misolimizda argonning ma'lum vaqtda hosil bo'ladigan, ya'ni fluktasion dipol atom atrofida elektron maydonni vujudga keltiradi. Bu maydon qio'shni atomga ta'sir etib, uning zaryadini siljitadi va natijada argon bilan bu atom orasida tortishish sodir bo'ladi.

Bu hodisaning sababini quyidagicha tushuntirish tug'riroq bo'ladi. Ta'sir qiluvchi atom yoki molekulani garmonik ossillyator deb qarash mumkin. Bu holda atom yoki molekuladagi elektronlarni muvozanat holati chegarasida garmonik tebranayotgan zarrachalar deb qarash mumkin. Elektronlar bunday tebranib turganligidan, atomning Har qaysida (o'rtacha dipol momenti nolga teng bo'lsa ham) dipol momenti nolga teng bo'lmaydi. Shuning uchun ossillyatorlar (atom yoki molekulalar) bir-biriga tortiladi. Bunday tortishish kuchi *dispersion kuch* deyiladi. Bu kuchni kvant mexanika tasavvuri yordamida dastlab London kashf etgan: dumaloq simmetrik tuzilishdagi molekula uchun quyidagi tenglama bilan hisoblab chiqargan edi:

$$U_D = - \frac{3}{2} \frac{I_1 \cdot I_2}{I_1 + I_2} \cdot \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6} \quad (3)$$

Bu yerda, $I_{1/2}$ — birinchi va ikkinchi atomning taxminan ionlanish potentsiallariga teng ($I - h\nu_0$). α_1, α_2 — ularning qublanuvchanligi, g — molekulalar yadrosi o'rtasidagi masofa.

Ikkita bir xil atomdan iborat molekula uchun:

$$U_D = - \frac{3 h \nu_0 \alpha^2}{4 r^6} \quad (4)$$

ν_0 — absolyut noldagi tebranish energiyasiga moye tebranish chastotasi.

Shunday qilib, tug'ma dipoli bor molekula bilan tug'ma dipoli bo'lmagan molekula orasidagi tortishish kuchi orientasion, induksion va dispersion kuchlar yig'indisiga teng

$$U = U_0 + U_U + U_D = -\frac{1}{r^6} \left[\frac{2\mu^4}{3kT} + 2\alpha\mu^2 + \frac{3}{4}h\nu a^2 \right] = -\frac{n}{r^6} \quad (5)$$

Demak, molekulalararo kuch molekulalar orasidagi masofaning oltinchi darajasiga proporsional ravishda kamayadi. Molekulalararo kuch kimyoviy kuchga nisbatan anchagina kichik, taxminan bir necha kkal-mol atrofida bo'ladi. Induksion kuch ham kichik bo'lib, Van-der-Vaals kuchining atigi 5% ini tashkil etadi. Tug'ma dipol momenti kichik bo'lgan molekulalar (SO, HJ) da orientasion kuch juda kichik, kuchli qutblangan molekulalarda esa birmuncha kattaroq qiymatga ega bo'ladi va Van-der-Vaals kuchining asosini tashkil qiladi. Qutblanmagan molekulalarda Van-der-Vaals kuchining asosiy qismi-ni dispersion kuch tashkil etadi. Umuman, yuqoridagi uch xil asosiy kuchdan boshqa kuchlar ham bor. Lekin ularning qiymati juda kichik bo'lganligi uchun ular ustida to'xtalmaymiz [9-13].

Bir-biriga ta'sir etuvchi molekulalar uzaro juda yaqinlashganda ular orasida itarishish kuchi paydo bo'ladi. Molekulalar o'rtasidagi itarishish energiyasi U_m taxminan

$$U_{it} = -\frac{m}{r^{12}} \quad (6)$$

ga teng.

Bu yerda: t — itarishish konstantasi (musbat qiymatli miqdor). Bu tenglamadan ko'rinib turibdiki, bu energiya masofaning 12-darajasi bilan o'zgaradi, ya'ni bu energiya juda kichik masofadagina mavjud bo'ladi, masofa kattalashishi bilan katta tezlikda kamaya boradi. Molekulalar orasidagi ta'sir kuchi tortishish va itarishish kuchlari yig'indisiga teng:

$$U = U_{tort} + U_{itar} = -\frac{n}{r^6} + \frac{m}{r^{12}} \quad (7)$$

3. §. Kvanto – kimyo nazariy hisoblashlarning tasnifi

Tajriba ya'ni bilan olish mumkin bo'lmagan natijalarni ham kvant ximiyaviy hisoblash yo'li bilan aniqlash imkonini beradigan va juda tez ishlaydigan kompyuterlar paydo bo'lishi bilan bu sohaga yanada qiziqish kuchaydi. Kvantximiyaviy hisoblash usullari takomillashtirilib, bugungi kunda murakkab sistemalarning tuzilish mexanizmlari to'g'risida ma'lumot olish uchun bu usullardan keng foydalanib kelinmoqda [14].

Kvanto-kimyo hisoblashlar natijasida tajribalarda spektrlarini tekshirish orqali turlicha agregatlarning molekulyar xarakteristikalarini aniqlash imkoniyatlari paydo bo'ldi, bundan tashqari agregatlangan bog'lanishlarda molekulalarning fazoviy tuzilishi va orientatsiyasi aniqlash imkonini beradigan usullar yaratildi. Shunday qilib, molekulalararo komplekslar modelida tajriba natijalar nazariy hisoblashlar orqali tushuntirish bugungi kunda gaz va suyuq holatlar fizikasining eng dolzarb vazifalaridan biri bo'lib qoldi. Natijada geometrik strukturalarni, energiyalarni, dipol momentlar, o'tishlar orasidagi va tebranishlar chastotalarini hisoblash imkoniyatlari paydo bo'ldi.

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'ektlar uchun, vodorod bog'lanish va Van-der-vaals molekulalararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molekulyar agregatlarni o'rganishda yangi eksperimental tadqiqotlar va kvanto-kimyo hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning "spektri, tuzilishi va xossalari" orasidagi bog'lanishlarni o'rnatish hamda molekulalararo o'zaro ta'sirlarni, molekulalar agregatlanishini va ularni o'rab turgan muhitning molekulaning spektral parametrlariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega [15].

Amaliy masalalarni kvant ximiyaviy hisoblashlar o'tkazish orqali hal qilish jarayonida quyidagi masalalarga e'tibor qaratish talab etiladi:

Tayyor dasturlar asosida o'tkaziladigan kvanto-kimyoviy hisoblashlar usulini tanlab olish.

Molekulaning termodinamik va spektroskopik parametrlarini aniqlaydigan zamaonaviy kvantximiyaviy hisoblashlarning aniqlik darajasi.

Molekulalar tuzilishi o'rganishda va amaliyotda kvanto-kimyoviy hisoblashlar natijalaridan foydalanish darajasi.

Spektroskopik usullar bilan kvantximiyaviy hisoblashlar bir-birini to'ldirgan holda o'rganilayotgan ob'ekt to'g'risida to'liq ma'lumot olish imkoniyatini yaratadi.

Umumiy qilib aytganda, kvanto-kimyo hisoblashlar taklif qilingan modelning o'lchangan natijalar bilan adekvatligini ta'minlash uchun molekulyar sistemalarda ma'lum bir yaqinlashishlar orqali Shredinger tenglamasining yechimini topish jarayoni deb qarash mumkin.

Tajriba orqali olish mumkin bo'lmagan, murakkab molekulyar tuzilmalarning va effektlarning xossalarini hisoblash uchun ko'pincha noempirik hisoblashlar – «ab initio» (lotinchadan «Boshlang'ich») qo'llaniladi. Noempirik hisoblashlar asosiy usullari Xartri –Fok –Rutan sxemasiga asoslanadi [16].

Xartri –Fok –Rutan sxemasidagi murakkabliklarni kamaytirish uchun juda ko'pchilik holatlarda elektron korrelyatsiya inobatga olinsa, kvantximiyaviy hisoblashlarning yarimempirik usullarda esa molekulalararo o'zaro ta'sir inobatga olinadi.

Zarracha xolatini tariflashda, zarrachaning xar bir ondagi fazodagi (x, y, z) koordinitalarini aniq qiymati va impulsning o'qlar bo'yicha tashkil etuvchilari (R_x , R_y , R_z) ning aniq qiymatlarini aniqlash tamoyilidan kelib chiqiladi. Shu bilan uning harakat traektoriyasini ifodalovchi chiziqni ko'rsatishi mumkin bo'ladi.

Real zarrachalar – mikroob'ektlar (elektron, atom, molekulalar) ularning maxsus tabiatiga ko'ra va fizikada ularga mos keluvchi ob'ektlarni mavjud emasligi tufayli, tariflash mumkin emas. Mikroob'ektlarning koordinata va impulsni bir vaqtda o'lchash paytida ularning qiymatlarida xatoliklar (aniqmasliklar) ro'y beradi, ular mos ravishda D_x , D_y , D_z , DR_x , DR_y , DR_z ga teng bo'ladi. D_x va DR_x xatoliklar bir vaqtda istalgan kichik bo'lishi mumkin emas, va koordinata qanchalik kichik xatolik bilan ulchansa, shunchalik katta xatolik bilan impuls o'lchangan bo'ladi. Bundan ko'rinadiki, elektron koordinatani bunday aniq xisoblash mumkin emas ekan, o'z navbatida koordinataning bunday noaniqligi

fazoda elektroning "Qo'yilganligi"ni aytib turadi va mikroob'ekt traektoriyasi to'g'risidagi tushuncha ma'nosini yo'qotadi.

Mikroob'ektlarning fazoda taqsimoti ehtimollik xarakteriga ega va nihoyat, ularni to'liqlar nazariyasining formulalari bilan yoziladi.

Bu masalani, xuddi klassik mexanikadagi Nyuton ikkinchi qonuni o'ynagan rol kabi, bu erda Shredinger tenglamasi asosidagi kvant mexanikasi echadi:

Bu yerda Ψ - psi-funktsiya (to'liq funktsiyasi), uning ma'nosi fizika kursining uchinchi qismida tushuntiriladi, E – mikroob'ektning to'liq energiyasi, U –uning potentsial energiya. Bu tenglamaning echimi, biror ehtimollik bilan mikro obektning berilgan fazoning nuqtasida bo'lishi va uning energiyasi haqida mulohaza yuritish imkonini beradi [14-16].

Elektron korrelyatsiya - atom yoki molekulyar sistemalarda barcha elektronlarning harakatini o'zaro bir butunligini xarakterlovchi kattalik. Korrelyatsiya esa o'z navbatida elektronlarning o'zaro elektrostatik itarishishi (Kulonovskaya korrelyatsiya) va sistemaning statik afzalliklari (pauli printsiipi) orqali aniqlanadi.

Kvanto-kimyó hisoblashlarni o'tkazish vaqtida juda katta integrallarni yechishga to'g'ri keladi, buni mazmuni shundan iboratki hisoblashlar siklik ravishda o'tkaziladi, ya'ni kompyuter ta'minlashi mumkin bo'lgan chegaraviy aniqlikga ega bo'linmaguncha jarayon takrorlanveradi.

Noempirik hisoblash usullarining eng oddiy usuli – Xartri-Fok usuli, bu usulda elektronlar orasidagi korrelyatsion itarishish kuchlari inobatga olinmaydi, faqatgina ularning ta'sirlashishining o'rtacha qiymati hisobga olinadi.

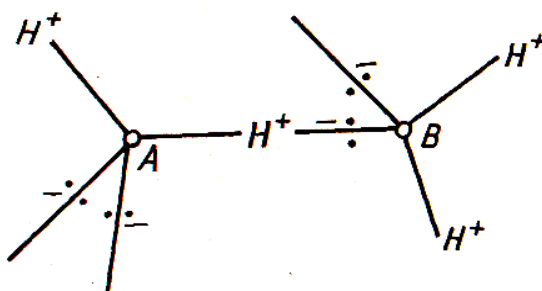
4. §. MOLEKULALARARO VODOROD BOG'LANISH VA ULARNING SPEKTRAL NAMAYON BO'LISHI

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan yana biri vodorod bog'lanishlardir. Agar vodorod atomi molekuladan kuchli elektromanfiylikka ega bo'lgan atom bilan kimyoviy birikkan bo'lsa, u boshqa

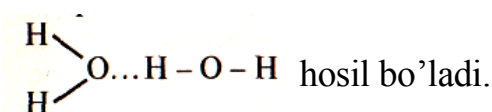
molekulaning yoki xudi shu molekulaning boshqa manfiy zaryadli atomi bilan yana bir qo'shimcha bog'lanishlar hosil qiladi. Lekin bu ikkinchi bog'lanish oddiy bog'lanishga qaraganda bo'shroq bo'ladi. 1887 yilda M. A. Ilinskiy kislorod yoki azot bilan birikkan vodorod boshqa atom bilan ham birika olshini, ya'ni vodorodda asosiy valentlikdan tashqari, qo'shimcha valentlik ham borligini aytdi va bu hodisani nazariy jihatdan asoslab berdi. Vodorod vositasida ikki molekula va ulardagi atomlar bir-biri bilan bog'lanishi mumkin [17].

Vodorod bog'i faqat birgina vodorod atomiga mansub bo'lib, bu xil bog' boshqa atomlarda bo'lmaydi. Vodorod atomining boshqa elementlardan farqi shundaki, unda bitta — yagona elektron bor. Vodorod o'zining shu yagona elektronini bog' hosil qilishga berib, elektronsiz yadro (proton H^+)ga aylanib ketadi. Bu protonning diametri boshqa atomlarning diametridan bir necha marotaba kichik, demak, yuzadagi elektr potentsiali juda kuchli, atrofida elektron qatlami bo'lmaganligidan, u boshqa atom yoki ionga yaqinlashganda itarishmaydi va aksincha tortishadi va hatto boshqa atom yoki molekulaning elektron qavatlarini ichiga kirib ketadi.

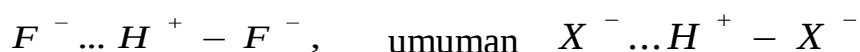
Vodorod bog'ining hosil bo'lish mexanizmini N. D. Sokolov kvant mexanika nazariyasi asosida izohlab bergan. Bu mexanizmni suv misolida ko'raylik. Suv molekulasida orbitallar tetraedr shaklida joylashgan bo'lib, uning uch qismida kislorod atomi bo'ladi. Bu orbitallarning ikkitasi O—H ni hosil qilish uchun sarflanadi (elektron juftlar bo'lingan), qolgan ikkita orbital esa taqsimlanmagan juft elektron bilan band bo'ladi. Bu joyda manfiy zaryad to'planadi, ya'ni, atomlararo dipol: hosil buladi [18].



Ikkita (H^+O) dipolning qarama-qarshi qutblari orasida elektrostatik tortishish — dipollararo tortishish vujudga keladi. Shu bilan bir vaqtda $\text{O}_2\text{—H}$ dipoli O_2 atomdagi bo'linmagan juft elektronlarni qutblaydi, natijada bu juft elektronlar O_2 bilan bog'langan H va O_2 atomlari o'rtasida bo'linadi, ya'ni O atomdagi H bilan O_2 atomi orasida kovalent bog' hosil bo'ladi. Bulardan tashqari, vodorod bog'ida Van-der-Vals tortishish kuchi ham ishtirok etadi, deb faraz qilinadi. Bu uchta tortishish kuchi O—H bog'ida ishtirok etgan elektronlar jufti va O_2 dagi bo'linmagan elektronlar juftining itarishishi bilan muvozanatda turadi. Natijada 20 kJ/mol energiyali vodorod bog' bor degidrol (H_2O_2)

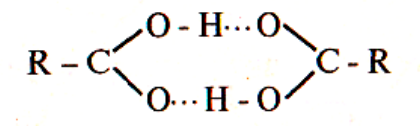


H_2F_2 , H_2F , HCl_2 larning mavjudligi vodorod bog'ining borligi bilan tushuntiriladi. Suyuq, vodorod ftorid $\text{H}_2\text{F}_2(\text{HF})$ molekula holida bo'ladi. Suvda eriganda H^+ va HF_2^- ion holda bo'ladi. HF_2^- anion molekulasi quyidagicha hosil bo'ladi; bitta ftor atomi vodorod bilan kuchli qutbli bog' hosil qiladi (deyarli vodorod elektronini o'qiga birlashtirib, H atomini H^+ ga aylantiradi va bu H^+ ioni deyarli kuchli tortib turadi, shu yo'sinda vodorod bog'i vujudga keladi:



nuqtali chiziq, ishorasi (...) vodorod, chiziq, ishorasi (—) qutbli (yoki ion bog'). Bu xil bog'lanishga **vodorodli ko'prik** deyiladi.

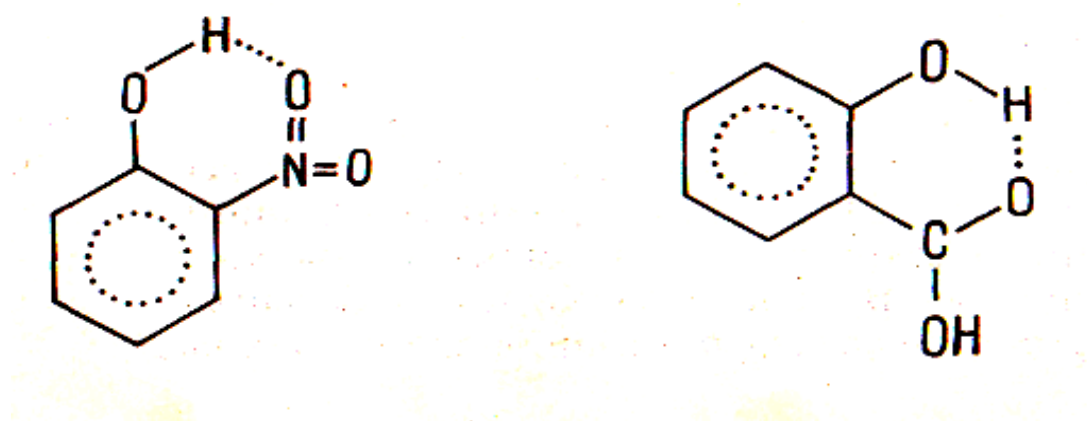
Karbon kislotalarning ikki molekulasi vodorod bog'i orqali birlashib assosilanadi:



Bu formuladagi punktir chiziqlar vodorod bog'ini ifodalaydi.

o- nitrofenol xossalari jihatidan *p*- nitrofenol va *t*- nitrofenoldan farq qiladi. Bu moddalarning xossalarini tekshirish *o*- nitrofenol molekulasida ichki

vodorod bog'lanishning mavjudligini va buning natijasida qo'shimcha xalqa hosil bo'lishini tasdiqlaydi:



Bu yerda vodorod bog'lanish nuqtalar bilan ko'rsatilgan.

r va *t* nitrofenollarda esa nitrogrupp bilan gidroksil grupp bir-biridan uzoq masofada turadi, shuning uchun ularda molekulalararo vodorod bog'lanish hosil bo'lmaydi. Vodorod bog'lanish tufayli salisil kislota va salisil aldegid molekulasida ham qo'shimcha halqa hosil bo'ladi [17-20].

Vodorod bog'lanishni har xil agregat xolatidagi moddalarda uchratish mumkin.

Suv molekulasidagi vodorod bog'ining mavjudligi suv va muzning fizik kimyoviy xossalarini belgilashda katta ahamiyatga ega. Yuqorida aytilganidek, muz kristallarida, har qaysi kislorodning tetraedrida, u boshqa to'rt atom kislorod bilan o'ralgan, ularning o'rtasida 4 vodorod atomi joylashgan, bulardan ikkitasi kislorod bilan $\lambda = 0,99 \text{ \AA}$ uzunlikdagi qutbli bog' hosil qilgan, qolgan yana ikkitasi $\lambda = 1,76 \text{ \AA}$ uzunlikdagi vodorod bog'ini hosil qilgan. Bunday murakkab tuzilish natijasida muzning zichligi kichik va u g'ovakli bo'ladi. Muz eriganda vodorod bog'i qisman uziladi va molekulalar bir oz yaqinlashadi, shunga ko'ra suv muzga nisbatan zich hisoblanadi. Suv isitilganda u kengayadi, ya'ni hajmi ortadi va vodorod bog'i uziladi, hajmi kichiklashadi. Shularga binoan suvning zichligi — 4°C da maksimumdan o'tadi.

Vodorod bog'lanish muammolari uning spektral namoyon bo'lish masalalari doirasi juda keng bo'lib, ko'p ilmiy ishlarda ko'rib chiqilgan. Vodorod bog'lanish energiyalari keng oraliqni egallaydi. Ular elektron tebranish va aylanish

spektrlarida namoyon bo'ladi. Ularni o'rganish infraqizil yutilish hamda kombinatsion sochilish spektri va IQ KS spektrlari yordamida olib boriladi.

Vodorod bog'lanish sistemalari infraqizil yutilish va kombinatsion sochilish bo'yicha to'plangan katta materiallar asosida tebranish spektriga qarab vodorod bog'lanishning hosil bo'lishini aniqlash imkonini beruvchi bir qator belgilari aniqlangan. A-H...B tipdagi vodorod bog'lanish hosil qilganda ham A2H, A-H bog'lanishning ham B guruhlarining chastotalari o'zgaradi. Bunda quyidagi tebranishlar kuzatiladi.

$R-A \leftarrow H \rightarrow \dots B$ ν_s A-H valent tebranish

$R-A \updownarrow H \dots B$ ν_d A-H difarmatsion tebranish

$R-A-M \dots B$ ν_t A-H aylanma tebranish

$R-A-H \dots \rightarrow B \leftarrow$ ν_δ A...V translatsion tebranish

$R-A-H \dots \updownarrow B$ ν_β A-H...B defarmatsion tebranish

ν_s, ν_t, ν_β - tebranishlar R-A-H molekulada vodorod bog'lanish bo'lmaganda ham mavjud bo'ladi. ν_s ba ν_p - tebranishlar esa vodorod bog'lanish bo'lgandan keyin hosil bo'ladi [17-20].

Vodorod bog'lanishning tebranish spektrida kuzatiladigan asosiy spektrlar belgilari quyidagilardir:

I. A-H guruhining valent tebranishi - ν_s

1. Valent tebranish palasasi va uning obertonlari past chastotaga siljiydi. Ko'plab sistemalarda bu siljish miqdorining o'nlab foizini tashkil qiladi.

2. a) Infraqizil yutilish spektrida vodorod bog'lanish palasa integral intensivligining ortishiga olib keladi. Uning obertonining intensivligi esa kam o'zgaradi.

b) Kombinatsion sochilish spektrida ν_s - ning intensivligining o'zgarishi haqida ishonchli tajribalar deyarli yo'q. Nisbiy intensivligi qisman ortadi.

3. Temperaturaning qisman o'zgarishi ν_s palasaning chastotasida va intensivligining keskin o'zgarishiga olib keladi.

4. Turli xil erituvchilar ham ν_s palasaning parametrlariga ta'sir qiladi.

II. R A-H guruhining ν_d defarmatsion tebranishi.

1. ν_d defarmatsion tebranish palasasi chastotasi erkin molekula chastotasiga nisbatan yuqoriga siljiydi. Bu holda nisbiy siljish uncha katta bo'lmaydi.
2. ν_d tebranish palasaning yarim kengligi va intensivligidan farqli ravishda unchalik o'zgarmaydi.

III. Vodorod bog'lanishning o'ziga tegishli bo'lgan yangi past chastotali tebranishlarning paydo bo'lishi, bu uzoq infraqizil oblastida kuzatiladi.

Vodorod bog'lanish molekullarning aylanma va ilgarilanma erkinlik darajalari sonining kamayishiga olib keladi va yangi tebranma erkinlik darajasi vujudga keladi. Valent va defarmatsion tebranish chastotasi $20-200\text{sm}^{-1}$ oblastda yotadi. Vodorod bog'lanishni o'rganishda to'liq spektroskopik ma'lumotni infraqizil yutilish hamda kombinatsion sochilish spektrlarini birgalikda qo'llagandagina olish mumkin. Bu ikki usul tebranish spektrini o'rganishda bir-birini to'ldiradi. Tanlash qoidasiga ko'ra, yuqori simmetriyaga ega bo'lgan molekullarda infraqizil yutilish spektrida kuzatiladigan kombinatsion sochilish spektrida kuzatiladigan tebranishlar IQ yutilish spektrida kuzatilmaydi.

Bundan tashqari past chastotalardagi tebranishlarni yorug'likni kombinatsion sochilish usuli bilan o'rganish qulay. Umuman olganda vodorod bog'lanishni o'rganishning juda ko'p usullari mavjud. Masalan yorug'likning molekulyar sochilishi, ultraakustik usul, yadro magnit rezonans usuli va hokoza. Lekin bu usullar vodorod bog'lanish haqida IQ yutilish va KS usullari beradigan to'liq ma'lumotni bera olmaydi [17-20]. Vodorod bog'lanish tebranma spektrida A-H valent tebranish palasasining past chastotalarga tomon siljishiga olib keladi. Qo'shni molekullarning proton donorlik va proton akseptorlik qobiliyatlariga qarab siljishning kattaligi 10sm^{-10} dan minglab sm^{-1} gacha o'zgaradi.

Chastota siljishi bilan asosiy holda vavlent tebranishlari chiziq intensivligining oshishi ham vodorod bog'larrishning muxim belgisi bo'la oladi.

Kuchsiz vodorod bog'lanishlar bir qator sistemalarda masalan, tarkibida proton donor sifatida xloroform tiol bo'lganda vodorod bog'lanish mavjudligini v A-H palasaning siljishiga qaraganda intensivlik tezroq ko'rsatadi. Haqiqatdan agar tipik vodorod bog'lanishlar uchun nisbiy siljish 10% dan oshmasa, v A-H palasaning intensivligi bir necha marta oshadi. Oddiy sharoitda valent tebranish chiziqlarining kengayishi vodorod bog'lanishlarning yana bir belgisi qaraladi. Ko'pincha bu kengayish bilan baravariga proton donori chiziqlarida murakkab struktura ham paydo bo'ladi. Adabiyotlarda vodorod bog'lanishli kompleks chiziqlarning formasi to'g'risida to'rtta umumiy nazariya muxokama qilinadi.

1. O'ta dissosiatsiya.
2. Chastota modulyatsiyasi.
3. Fermi rezonansi.
4. Fluktatsion nazariya.

Barcha sistemalar uchun ham qo'llanilishi mumkin bo'lgan chiziqlarning kengayishini to'liq tushuntiruvchi umumiy nazariyalarning bo'lishi mumkin emasligi ravshan, chunki vodorod bog'lanishli sistemalar juda xilma xil. Shuning uchun ham turli xil vodorod bog'lanishlarda ayniqsa turli agregat xolatlarda kengayish sabablari har holda o'ylash tabiidir.

Vodorod bog'lanishlarning deformatsion tebranishlarda ko'rinishini muntazam tekshirishga bag'ishlangan ishlar ko'p emas. Chunki ular keskin ajralib, namoyon bo'lmaydi. Odatda bu tebranishlar chiziqlarida yuqori chastotali siljish va intensivlikning ozgina o'zgarishi qayd qilinadi [17-20].

Oxirgi yillarda kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarini o'rganish uchun matritsali izolyatsiya deb ataladigan yangi usul muvofaqiyatli ravishda qo'llanilmoqda. Bu usul vodorod bog'lanishli modda bilan ko'p miqdor inert gaz aralashmasini diffuziya yuz bermaydigan haroratda tez sovutishdan iborat. Sovutilgan ideal gaz shunday qattiq matritsani hosil qiladiki, unda kondensatsiya vaqtida mavjud bo'lgan barcha asossiatsiyalar izolyatsiyalanadi.

II. BOB. AMALIY QISM

1. §. Tanlab olingan moddaning xususiyatlari

Molekulalar formulasi CH_3NO_2

Sinonimi: Dimitil formamid DMFN-formulasi ishlatiladi.

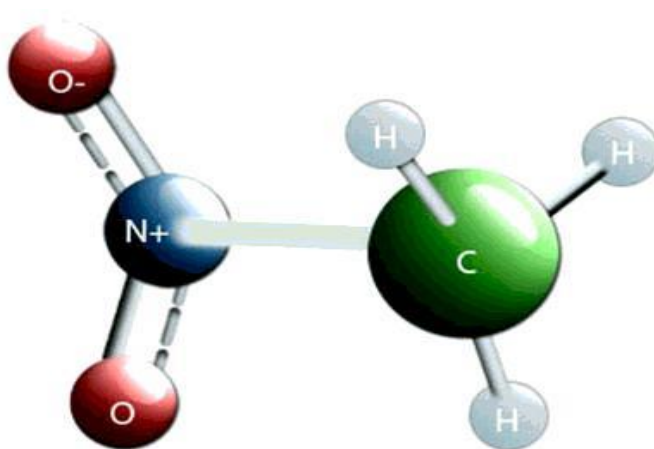
Xossalari:

Rangsiz suyuqlik bo'lib, o'ziga xos xususiyatga ega.

Modda achchiq hidga ega bo'lgan suyuqlik. Ushbu suyuqlik 4000^0 C haroratda sariq rangda olovlanadi.

Qo'llanilishi

N, N-Dimetil shaklli apratonli erituvchi bo'lib, suniy tola, lak bo'yoq materiallari, suniy teri, polimerlar va h.k larni ishlab chiqarishda asitilenli va dienli uglevodorodlarni neft maxsulotlaridan piroliz fragmentlar gazlaridan, amifatin hamda tozalashda xushbo'y uglevodorodlarni ekstrasiyalash, qog'oz, viskoza, yog'ochlar, teri turli matolarni bo'yashda bo'yoqlarni eritish uchun, galoginlashda, gidroxlorlashda, chegarasiz birikmalarni gidroksionlashda, degidrogalogiklashda formarillash, kolba bo'yicha elektrosintez va boshqalar. Farmasevtika sanoatida sulfat gedrostirikdomilining asetat gedrokartizon va boshqalarning kristallanishidan tozalash uchun [21].



Xarakteristikasi

Nomi Nitrometan

Dimetilformalarning massaviy xossasi, % larda 99,9dan kam emas.

Sig'imli (Pt-Co), katta emas 10

Dimetilamining massaviy xossasi, ppm, katta emas 15

Chumoli kislotasining massaviy xossasi, ppm, katta emas 25

PH 7,0-7,5

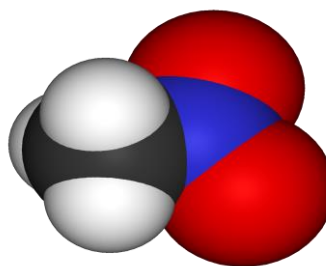
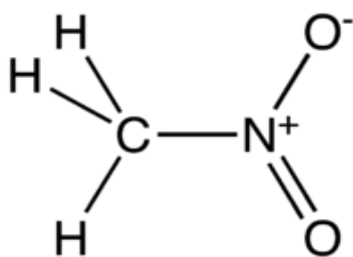
Namlikning massaviy xossasi, katta emas 200

Sistemaani nomlanish N,N-Dimetelformamid

Qisqartma nomi DMFA

An'anaviy nomi CH_3NO_2

Emprik formulasi CH_3NO_2



Fizikaviy xossalari

Holati (turg'un, sharti)-rangsiz suyuqlik

Molyar massasi 61 g/mol

Zichligi $1,138\text{g/sm}^3$

Dinamik qovushqoqligi 0,61 Pas (20°C)

Termik xossasi

Erish temperaturasi 36°C

Qaynash temperaturasi $101,2^\circ\text{C}$

Chaqnash temperaturasi 59°C

Molyar issiqlik sig'imi $148,37\text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ hosil bo'lish energiyasi $192\cdot\text{K J/mol}$

Bug'lanishning solishtirma issiqligi $42,3\text{ J/Kg}$

Tuzilishi va xossalari

Dimitilformamidda ikki rezonans shakilning mavjudligi sababli $C=O$ bog'lanish tartibi kamaygan, $C-N$ esa ko'paygan. Masalan, infraqizil spektrda karboniya guruhining chastotasi (1675cm^{-1}) erkin xuddi shu guruhga nisbatan kamayishi kuzatiladi. Hamda azotuglerodning bog'lanishining qisman ikkilanganlik xarakteri tufayli, xona haroratda bo'lsa PMR vaqti ikkalasi bo'lsa uning atrofiga aylanishi tormoqlanadi. Bunda 6 protonli bitta segment o'rniga intensevligi 3 protonli bo'lgan ikkita signal(segmentlar) kuzatiladi [22].

Rasm. DMFA ning ikkita rezonans shakillari DMFA uglevodoroddan tashqari ko'pgina organik erituvchilar bilan ajralib turadi.

Olinishi

- Demetilamil bilan metanoldagi is gaz reaksiyasi bo'yicha ($100-150^{\circ}\text{C}$, 2,5-20 Pa) CH_3ONa yoki metallar karbonadlari ishtirokida
- Metilformamidning dimetilliklar bilan reaksiyasi ($80-120^{\circ}\text{C}$ va 0,1-0,4 MPa)
- Chumoli kislotasining dimetillik bilan HCOOH

Qo'llanilishi

DMFA quyidagilarda qo'llaniladi

- Poliprilonitril tola (nitrol) va boshqa polimerlar qo'llab chiqarishda erituvchi sifatida.
- Teri, qog'oz, yog'och va bo'shqalarni bo'yash uchun bo'yoqlarning eritish uchun.
- HCl , SO_2 va boshqa kislota gazlarining absorbsiyasi uchun EPR spektroskopiyasida asitonitril bilan birga farq qiluvchi sifatida tez-tez foydalaniladi.
- Badiiy asarlarni ta'mirlashda erituvchi sifatida
- Vilomer bo'yicha aldigetlarni olish uchun.
- Yaqin infraqizil sohasida spektroskopik tadqiqotlar o'tkazish uchun
- Suvsiz muhitlarda kuchsiz kislotalarni kislota-asosli filtirlashda muhit sifatida [21-23]

2.8. TAJRIBA QURILMASI VA UNING ISHLASH PRINSIPI

DFS-52 spektrometri lazer manbai yordamida yoritilgan suyuq, kristal va polikristal moddalarda kombinatsion sochilish konturini olish va qayd qilish uchun muljallangan. Shuningdek bu spektrometr molekulyar — spektraskopiya oblastida fizika — kimyoviy tekshirishlar, ya'ni suyuqliklar suv aralashmalari, kristallar, plyonkalar tarkibi tuzulishini o'rganishga mo'ljallangan [24].

Ishlash prinsipi

Tekshirilgan namunani monoxromatik yorug'lik bilan nurlantirganda sochilgan yorug'likning spektrida kombinatsion sochilish chiziqlari kuzatiladi. Bu chiziqlarning chastotasi namunaga tekshirilayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasining kombinatsiyasidan iborat bo'ladi. Kombinatsion sochilish chizigining intensivligi kichik bo'lib ularni qayd qilish uchun yorug'likni kam sochuvchi monoxramatlardan foydalaniladi. Shuningdek shovqin kam yetarlicha stabil bo'lgan, qayd qilishning sezgir chastotalaridan foydalanish zarur. DFS-52 spektrometrining uyg'otuvchi manba sifatida seriyali lazerlar ishlatiladi. Yorug'likni tekshirish uchun yorug'likni kam sochuvchi difraksion panjarali qo'shaloq monoxromatorlardan foydalaniladi. Spekrtni qayd qilish sovitilib turiladigan fotoelektron ko'paytirgichlar yordamida amalga oshiriladi. Hisoblash qurilmasi spektrlarning ketma-ketligi va spektral diapozoning berilgan qismiga signallarning ketma-ket qayd kilinishi, olingan natijalarning matematik qayta ishlashni va natijalarni qayd qiluvchi asbobga chiqarishni ta'minlaydi [24-27].

DFS-52 spektrometrining tarkibi

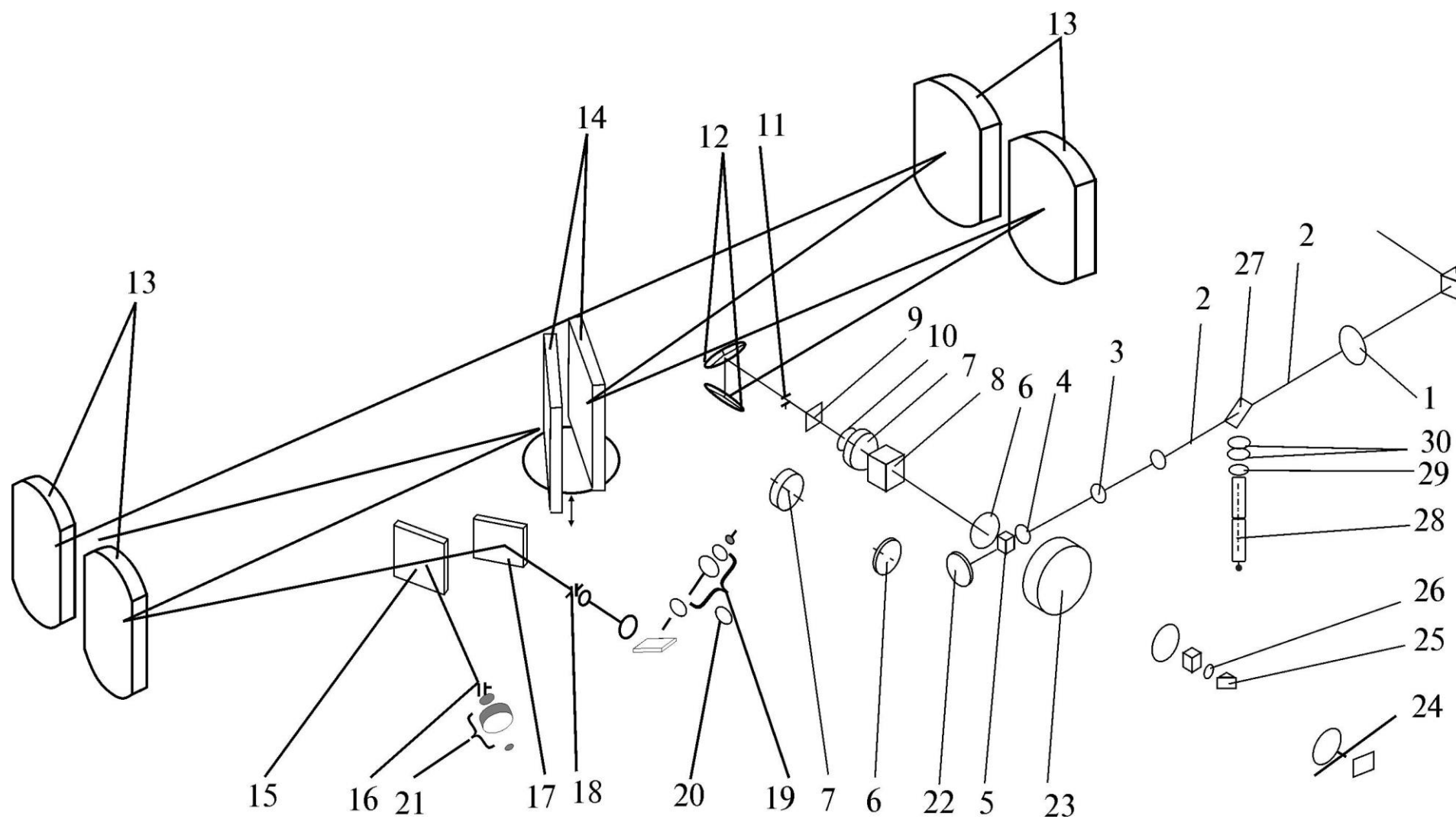
Spektrometrning tarkibiga almashtiriladigan difraksion panjarali qo'shaloq monoxramator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi, chastotalar va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluvchi qurilma ERU-53, termoelektron sovutgichning blok pitaniyasi, alfavit raqamli display va yozuvchi qurilma,

programmani tayyorlash sistemasi **IPG-003** ga kiruvchilar, laboratoriya o'zi yozuvchi asbobi **LKS-003**, ulash kabellari va o'tkazgichlar komplekti, almashtirish va ehtiyot qismlari kiradi.

Optik sxemasi

Spektrometrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qushaloq monoxromator va qabul qiluvchi qurulma elementlaridan iborat. Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishini ta'minlaydi. Namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qushaloq monoxromatorning kirish tirqishiga yo'naltiradi. Qo'shaloq ko'zguli monoxromator almashtiruvchi difraksion panjaraga ega bo'lib u uyg'otuvchidan 20 sm masofada 8-25 sm/mm gacha teskari chiziqli dispersiyani ta'minlaydi. Qabul qilish blogining qayd qilish maydonida monoxromator qorachig'ining tasvirini beradi. Qabul qilish bloki taqqoslash kanalining oldiga o'rnatilgan yorug'lik o'tkazgich unga lazer nurlanishining bir qismini o'yg'otadi. DFS-52 spektrometrning optik sxemasi 3-rasmda keltirilgan.

Yorug'lik manbaidan lazerning parallel nurlar dastasi (1) tor yo'lli interferension yorug'lik filtridan, (2) krisovaya difrakmasidan, (3) qutublovchi plastinkadan, (4) almashtiruvchi obyektlaridan biri orqali namuna (5) tekislikka fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish sferik linza (6) lardan biri orqali proyeksiyalovchi sistemada to'planadi va parallel dasta bo'lib obyektiv (7) dan iborat proyeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qushaloq monoxromatorning kirish tirqishi oldidan 2,3 yoki 3,5 marta kattalashtirib beradi. Linza oldi bilan obyektiv (7) orasida parallel nurlar dastasiga prizma analizator (8) quyish mumkin. Polyarizasion tekshirilar o'tkazilganda monoxromatorning kirish tirqishi oldiga dipolyarizasiyalovchi klyonka (9) qo'yiladi. Yorug'lik filtrlar (10) spektrning 800 Nm dan yuqori oblastida ishlaydi. Kirish tirqishi (11) ning orqasiga ikkita yassi buruvchi ko'zgudan iborat yorug'lik dastasini buradi. Monoxromatorning obyektivi (13) sifatida parabolasion ko'zgular ishlatiladi. Difraksion panjaralar (14) ni almashtirish mumkin (to'lqin uzunligi 400-600 Nm diapozonida 1mm da

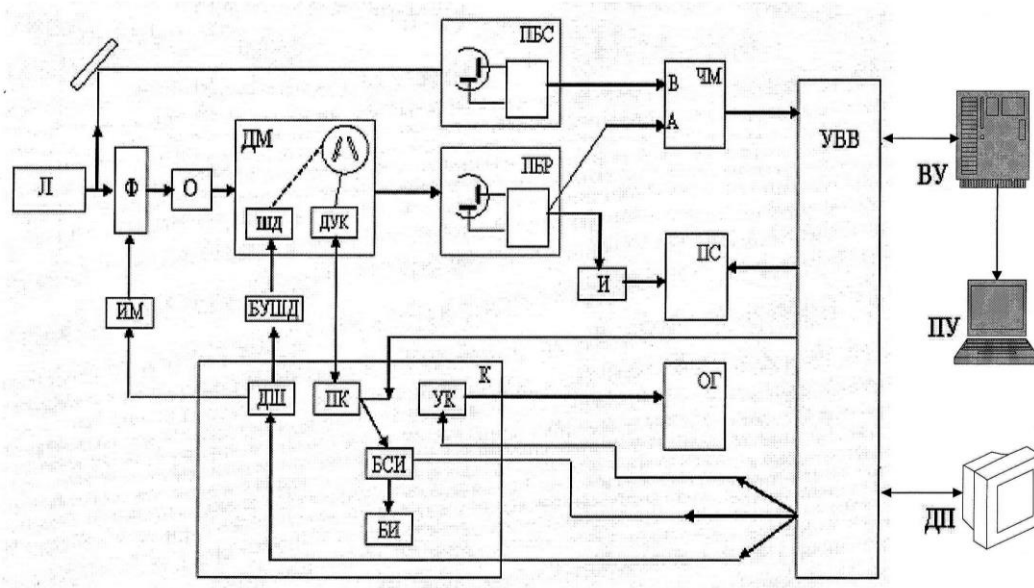


3-rasm. DFS-52 spektrometrining optik sxemasi.

1800 mm chiziq bo'lgan panjaralar ishlatiladi). Chiqish buruvchi ko'zgu (15) difraksiyalangan yorug'lik chiqish tirqishiga (16) yo'naltiriladi. (15) ko'zgular yorug'lik dastasidan olgan buruvchi ko'zgu (17) yorug'likning chiqish tirqishining imitatoriga (18) yo'naltiriladi [26].

Bu esa spektrning chiqargan oblastini okulyar (20) li ko'rish trubasi orqali kuzatish mumkin. Qabul qiluvchi blokka o'rnatilgan obyektiv (21) asbobning qorachig'ini fotoelektron kupaytirgich katodiga 1/20 kattalashtirishda akslantiradi. Lazer yorug'lik dastasidan to'la foydalanish maqsadida yoritish sistemasi shaffof moddalar bilan ishlanganda sferik ko'zgu (22) qo'yiladi. Bu esa lazer nurining moddadan qayta o'tishini ta'minlaydi. Ko'zgu (9) yorug'lik dastasining namunadan kuzatish yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalishda sochilgan qismidan foydalanishni ta'minlaydi. Hbtayotgan yorug'likdagi namunalar bilan ishlash uchun buruvchi prizma (25) va qisqa fokusli linza (26) ishlatiladi. Bular lazer nuri ning kukun yoki suyuqlik uchun muljallangan idishga proyeksiyalaydi. Plastinka (27) lazer nurining 1.5-2% ni yorug'lik o'tkazgichining (26) kirishiga uzatiladi.

Yorug'lik o'tkazgichi orqali nurlanishni taqqoslash kanalining qabul qiluvchisiga uzatiladi. Bunda yorug'lik oqimining intensivligining qupol regulirovkasi yorug'lik dastasiga yorug'lik filtri (29) ni kiritishi bilan amalga oshiriladi [26].



4-rasm. DFS-52 spektometrining funksional sxemasi

Moddalarni eksperimentga tayyorlash

Moddani oldindan tayyorlash xarakterini o'lchash uchun yaroqli spektrni olish uchun zarur bo'lgan quyidagi asosiy talablar bilan aniqlanadi.

1. Molekulaga tegishli bo'lmagan sochilishni qaytarish uchun modda tozalangan bo'lishi kerak.
2. Modda fluorensiyalangan erkin bo'lishi kerak. Ko'p hollarda fluorensiya tozalanmagan suyuqlilarda oz miqdorda aralashmalar borligi tufayli kelib chiqadi. Fluorensiya natijasida spektrni kuzatishga, aniqsa tekshirilayotgan moddaning kichik konsentratsiyasini o'lchashga xalaqit beradigan kuchli fon kelib chiqadi.
3. Modda iloji boricha rangsiz bo'lishi kerak. Hamma tekshirilayotgan moddalar "X4" va "4DA" markazdan o'lchab olingandan keyin qo'shimcha ishlov berilgan suyuqlik oldidan fosfor yordamida quritiladi. Suv miqdori fonning kuchayishiga, fosforning yuvilib ketishiga olib keladi. Binar aralashmalarni tayyorlashda eritilgan modda molekulaning soni erituvchi modda molekula soniga nisbati bilan o'lchanadi. Binar aralashmalarni solishtirishni osonlashtirish uchun nisbiy mol tarkibi eritilgan modda erituvchi hajmlarning nisbati orqali aniqlanishi mumkin.

1.1 konsentratsiyada ya'ni eritilgan modda molekulalarining soni erituvchi molekulaga teng bo'lgan konsentratsiyada nisbiy mol tarkibini modda hajmlarining nisbati orqali quyidagicha aniqlanadi: $M_1d_1/M_2d_2=V_1/V_2$

Bu yerda M_1 , M_2 – eritilgan modda va eritiluvchi moddaning molekulyar og'irliklari, d_1 va d_2 – ularning zichliklari, V_1 , va V_2 – ularning hajmlari (sm^3 da). Bu formuladan ko'rinadiki, istalgan konsentratsiyali eritilgan modda hajmining erituvchi hajmiga nisbati orqali aniqlash mumkin. Bu yerda idishni to'ldirish va konsentratsiyani olish uchun shprezdan foydalaniladi. Bunday oddiy qurilma zarur konsentratsiyani yetarlicha tez va aniq tayyorlashga imkon beradi. Xuddi mana shu usul yordamida etil spirtining to'rt xlorli uglerod va asetonitril molekulalari bilan eritmaları tayyorlanadi.

3. §. NAZARIY HISOBLASHLARNI BAHOLASH

Ushbu malakaviy bitiruv ishida olidimizga quyilgan maqsad, tajriba natijalarini kvanto-kimyoviy hisoblashlar bilan taqqoslash edi. Bu hisoblashlar tajriba olingan natijalarni to'g'riligini taqqoslash bilan birga, ularni tahlil qilishni osonlashtiradi.

Turlicha hisoblash usullariga asoslangan kvanto-kimyoviy hisoblashlar uchun ishlatiladigan dasturlar bugungi kunda ko'plab yaratilmoqda.

Bizning ishimizda qo'llanilgan hisoblashlar Gaussian 98W dasturi yordamida Xartri-Fok usulida amalga oshirildi [28].

Toloul molekulasiining monomer va dimer molekulasiining optimizasiyalangan ko'rinishlari uchun kvanto-kimyo hisoblashlar Xartri-Fok usulida 6-31G(d) Gauss funksiyalari yordamida amalga oshirildi. Energiyalari bo'yicha optimizasiya tekshirilayotgan obyekt uchun butun ichki koordinatalar bo'yicha amalga oshirildi. Normal tebranishlar chastotalari umumiy energiyadan ikkinchi darajali hosila olish yordamida hisoblandi.

Kvanto-kimyoviy hisoblashlar natijaslarida quyidagi tartibda xatoliklarni hisobga olish talab etiladi:

- bog'lanish uzunliklari 0,01 – 0,02 Å gacha aniqlikda hisoblanadi.;
- valent burchaklar ~ 1 % gacha aniqlikda;
- Energiyalar 2 kkal/mol gacha aniqlikda hisoblanadi.
- Chastotalar uchun esa 10-12 % ga yuqori chiqadi, tajriba natijalari bilan taqqoslash uchun ko'paytuvchi $0,89 \pm 0,01$ ishlatiladi [28].

III. BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

1.8. NITROMETAN TEBRANISH POLASASINING KOMBINATSION SOCHILISH SPEKTRLARI

Molekulalararo o'zaro ta'sir tabiatini o'rganish zamonaviy molekulyar fizikaning asosiy tushunchalaridan biridir. Moddalarning asosiy xususiyatlarini va fizik tabiatini o'rganishda molekulalararo ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirlarning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli xil optik usullar qo'llaniladi, yorug'likning kombinatsion sochilish spektrlarini tahlil qilish orqali modda xususiyatlarini o'rganish va natijalarni zamonaviy kvanto-kimyoviy hisoblashlar orqali olingan natijalar bilan solishtirish bugun kunda eng yaxshi natijalar beradigan usullardan hisoblanadi. Moddalarning xossalari uning qanday molekulalardan tuzilganligiga va bu molekulalar o'zaro qanday joylashganligiga bog'liq. Amaliyotda ko'pgina masalalarni hal qilishda moddadagi molekulalarning miqdorini, ularning tuzilishini va boshqa xossalarini turli agregat holatlarda bilish talab etiladi. Shu maqsadda suyuqliklarni o'rganish masalasi hozirgacha dolzarbdir.

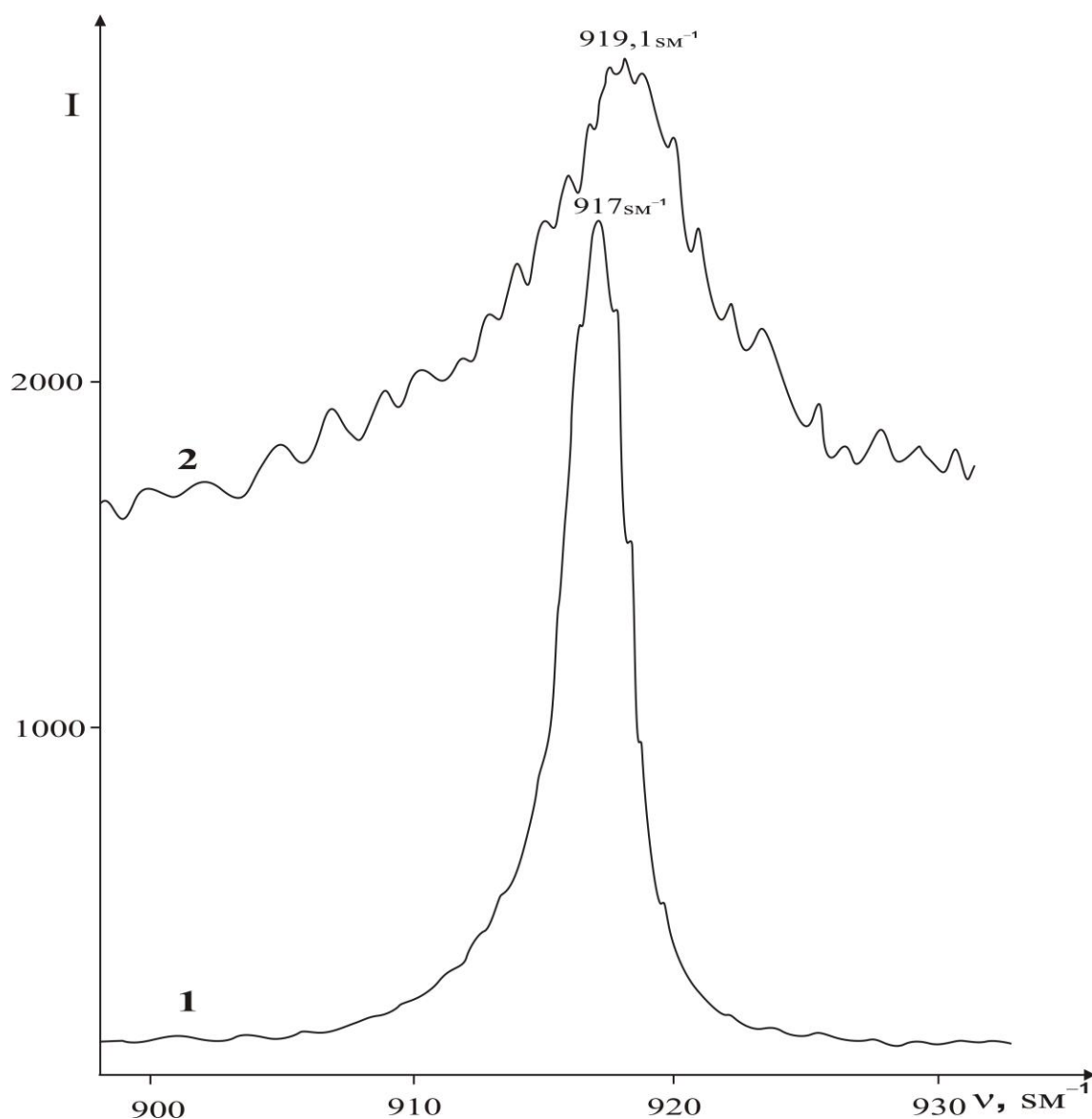
Bu ishning maqsadi nitrometanning tiofen eritmalarida sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchini yorug'likni kombinatsion sochilish spektri hamda kvanto-kimyoviy hisoblashlar yordamida o'rganishdan iboratdir.

Tajriba natijalari shuni ko'rsatadikim yorug'likning kombinatsion sochilish usuli yorug'likning infraqizil qizil yutilish spektriga nisbatan ma'lum ustunlikka ega bo'lib, bu ustunlik shundan iboratki yorug'likning kombinatsion sochilishida sochilgan yorug'likning parallel va perpendikulyar qismlarini alohida-alohida o'rganish mumkin [29-30]. Bu esa molekulalarni tebranma va aylanma harakatlari alohida o'rganishga imkon yaratadi. Yuqorida ta'kidlab o'tilganidek bitiruv ishining oldiga quyidagi vazifalar qo'yilgan:

- a) Nitrometanning tiofendagi eritmalarida kombinatsion sochilish spektri yordamida molekulalararo ta'sir kuchlarini o'rganish.

b) Tajribada olingan natijalarni to'liqroq tushuntirish maqsadida nitrometan tiofen sistemasi uchun kvanto-ximik nazariy hisoblashlar o'tkazish.

Qo'yilgan maqsadlarga erishish uchun biz avtomatik ravishda ishlovchi DFS-52 spektrometri [24] va yorug'lik manbai sifatida esa to'lqin uzunligi $\lambda = 6328 \text{ \AA}$ gat eng bo'lgan He-Ne lazeridan foydalanildi, dastlab toza holda nitrometanni $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ kombinatsion sochilish chizig'i o'rganildi.



5-rasm. Nitrometanning kombinatsion sochilish spektrlaridagi 917 cm^{-1} spektral chizig'i. 1- parallel tashkil etuvchisi (nitrometan+tiofen 0,9-0,1 m.u.); 2- perpindikulyar tashkil etuvchisi (nitrometan+tiofen 0,9-0,1 m.u.).

Tajriba natijalari shuni ko'rsatadiki nitrometanning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ kombinatsion sochilish chizig'ining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining maksimumiga mos keluvchi chastotalar bir-biriga nisbatan 2 sm^{-1} ga siljigan bo'lib bu spektral chiziqlarning yarim kengliklari mos ravishda $\Delta \nu_{\parallel} = 5,8 \text{ sm}^{-1}$ va $\Delta \nu_{\perp} = 12,4 \text{ sm}^{-1}$ ni tashkil qilar ekan(5-rasm).

Tajriba natijalari shuni ko'rsatadiki toza nitrometanning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ kombinatsion sochilish chiziqlarining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining maksimumiga mos keluvchi chastotalar bir-biridan $2,3 \text{ sm}^{-1}$ ga farq qilar ekan. Ya'ni sochilgan yorug'likning perpendikulyar tashkil etuvchisini maksimum ($J_{\perp}$) parallel tashkil etuvchisiga nisbatan ($J_{\parallel}$) $2,3 \text{ sm}^{-1}$ yuqori chastotada joylashgan ekan. Chastotalarning bunday farq qilishi kombinatsion sochilish chizig'ini murakkabligidan dalolat beradi. Ya'ni nitrometanning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ chizig'i bir emas bir qancha chiziqlar yig'indisidan iborat degan fikrga olib keladi va bu chiziqlarning b kengliklari mos ravishda $\Delta \nu_{\perp} = 12,4 \text{ sm}^{-1}$ hamda $\Delta \nu_{\parallel} = 5,8 \text{ sm}^{-1}$ ni tashkil qilar ekan.

Agar biz nitrometanni tiofenda eritsak tiofenning miqdori oshishi bilan sochilgan yorug'likning parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarini maksimumiga mos keluvchi chastotalar orasidagi farq kamaya boradi (5-Rasm).

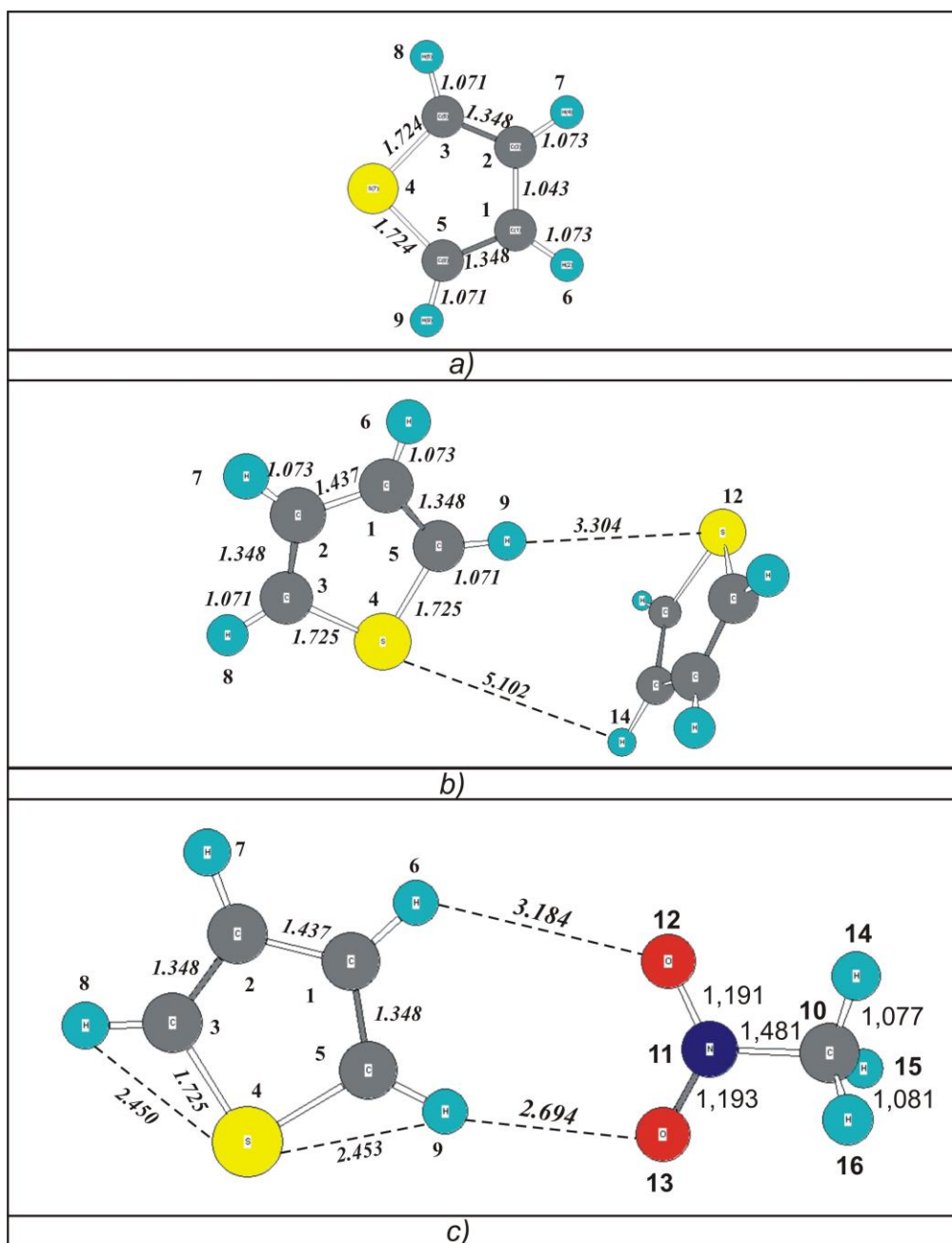
Haqiqatdan ham rasmdan ko'rinadikim nitrometanning miqdori kamaygan sari bu farq ya'ni $(\Delta \nu_{\perp} - \Delta \nu_{\parallel})$ kamaya borar ekan.

Nitrometanning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ chiziqlarining kengligi esa tiofenning miqdori oshishi bilan kam miqdorga oshar ekan. Masalan nitrometanning toza holatda bu chiziqning perpendikulyar tashkil etuvchisining kengligi $\Delta \nu_{\perp} = 12,4 \text{ sm}^{-1}$ parallel tashkil etuvchisining kengligi $\Delta \nu_{\parallel} = 5,8 \text{ sm}^{-1}$ bo'lsa uning 0,2 mol ulushida esa bu chiziqlarning kengligi atigi mos ravishda $\Delta \nu_{\perp} = 13,4 \text{ sm}^{-1}$ hamda $\Delta \nu_{\parallel} = 6,4 \text{ sm}^{-1}$ ga oshar ekan.

Tajribada olingan natijalarni yanada to'liqroq tushuntirish maqsadida o'rganilgan nitrometanning toza holdagi va uning tiofen bilan eritmaları uchun kvanto-kimyo hisoblashlar o'tkazildi. Bunday nazariy hisoblashlar Gaussian-98

dasturi RHF yaqinlashishda 6-31G⁺⁺(d,p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi [28].

Kavanto-kimyoviy hisoblashlar natijalari shuni ko'rsatadiki nitrometan molekulali monomer, dimer va trimer holatlarda mavjud bo'lar ekan (6-Rasm). Nitrometan molekulasining bunday holatlarda mavjud bo'lishi uning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ chizig'i murakkab bo'lib ya'ni bu chiziq bir emas bir qancha chiziqlardan iborat degan xulosani tsdiqlaydi.



6-rasm. Kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari. a) nitrometan molekulasi monomeri; b) nitrometan molekulasi dimeri; c) nitrometan+tiofen molekulalari dimeri.

Xuddi shuningdek nazariy hisoblashlar shuni ko'rsatadiki, nitrometanning 13 chi kislorod atomi tiofenning 9 chi vodorod atomi tomom orentirlangan bo'lib ular orasidagi masofa esa $2,694 \text{ \AA}$ ni tashkil qilar ekan. Bu esa nitrometan va tiofen molekulalari orasida kuchsiz vodorod bog'lanish mavjudligidan dalolat beradi (5-Rasm). Bunday nazariy hisoblashlar natijasi tajriba orqali olingan natijalar xulosasiga mos keladi.

Biz yuqorida ko'rib o'tdikki yorug'likning kombinatsion sochilish spektri yordamida bir vaqtni o'zida sochilgan yorug'likning turlicha qismlarini (komponentalarini) ya'ni izotrop va anizotrop qismlarini alohida-alohida o'rganish mumkin ekan. Qachonkim sochilgan yorug'likning bu qismlari molekulalarni tebranma va aylanma harakatlari bilan bog'liqdir.

Bitiruv ishining amaliy maqsadlaridan biri bu molekulalararo ta'sir kuchini molekulyar jarayonlarga ta'sirini nitrometan va tiofen uning eritmalari misolida o'rganishdan iboratdir.

Nitrometan (CH_3NO_2) uglevodorodlar hamda va boshqa organik birikmalarda yaxshi eriydigan modda bo'lib uning qaynash temperaturasi $T_{\text{qay}} = 101^\circ \text{C}$ ga tegdir. Molekulaning dipol momenti $\mu = 0,55 \text{ D}$ ga tengdir.

XULOSA

Olingan natijalardan quyidagi xulosalarga kelish mumkin

1. Nitrometan va uning tiofendagi kombinatsion sochilish spektrlari avtomatik ravishda ishlovchi DFS-52 spektrometrda o'lchandi.
2. Tajriba natijalari shuni ko'rsatadi toza nitrometanning $\nu = 917 \text{ sm}^{-1}$ kombinatsion sochilish chizig'ining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchi chiziqlarining maksimumiga mos keluvchi chastotasi $2,3 \text{ sm}^{-1}$ ga siljigan ekan va bu farq nitrometanning tiofen eritmalarida tiofenning miqdori oshishi bilan kamaya borar ekan.
3. Kvanto-kimyoviy hisoblashlar shuni ko'rsatadiki nitrometan molekulalari o'zaro monomer va dimer hosil qilar ekan.
4. Nitrometan va tiofen molekulalari molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida yopiq strukturali dimer hosil qilir ekan.
5. Tajribada olingan natijalar kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari bilan mos kelar ekan.

ADABIYOTLAR

1. Ferraro J.R., Nakamota K. Introductory Raman Spectroscopy. Academic. Press Jns. 1994. p.363.
2. Горелик В.С. Комбинационное рассеяние света. //Труды ФИАН. 1997.с.8-14.
3. Фабилинский И.Л. Комбинационному рассеянию // УФН. 1998. Т.168. №12. с.1341-1360.
4. Сушинский М.М. Вынужденное комбинационное света. М.: Наука, 1985. с.173.
5. G.S. Landsberg "Optika" . Toshkent "O`qituvchi"— 1981 yil.
6. Molekulyar optika fanidan ma`ruzalar matni. V.T. Qo`yliyev A. Jumaboev Qarshi – 2010
7. Кольрауш К.. Спектри комбинационного рассеяния. Издательство инстранный литературы. Москва 2000 г.
8. Хабубиллаев П.К., Булавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х., Лизенгиевич А.И., Отажонов Ш.О., Жумабаев А. “Динамика молекул в жидкостях”. Издательства Наук. Республики Узбекистан. 2009г
9. Преждо В.В., Крайнов И.П. Межмолекулярные взаимодействия и электрические свойства молекул. - Харьков, 1994, -239 С.
10. Краснова К.С. Строение вещества. -Москва, Высшая школа, 1995, - 512 С.
11. Валькенштейн М.В. Строение и физические свойства молекул. – Москва, Ленинград, 1955, -638 С.
12. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – Москва: Наука, 1982, -312 С.
13. Бахшиев Н.Г. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий. -Л. Изд. Наука. 1972. -265 С.

14. Frish M.J, Head-Gordon M, Pople J.A. Direct analytic SCF second derivatives and electric field properties // J. Chem. Phys. 1990, 141, pp. 189-196.
15. Becke A.D. Density functional thermochemistry 3 the role of exact exchange // J. Chem. Phys. 1993, 98 (7), pp. 5648-5652.
16. Lee C., Yang W.R., Parr G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B. 1988, 37, pp. 785.
17. Соколов Н.Д. Водородная связь. Успехи физических наук. 1955, Т. LVII, вып 2. С. 205-278.
18. Соколов Н.Д. Водородная связь. М.: Наука, 1981, -287 С.
19. Пиментал Дж., Мак-Клеллан О. Водородная связь. -М.:Мир. 1964, С.462
20. Pimentel G.C., McClellan A.L. The Hydrogen Bond, Freeman: San Francisco, 1960. p. 195.
21. www.google.co.uz
22. www.ziyonet.uz
23. www.wikipedia.uz
24. Техические описание ДФС-52.
25. Бабушкин А.А., Бажулин П.А., Королев Ф.А., Левшин Л.В., Прокофьев В.К., Стриганов А.Р. Методы спектрального анализа. М., МГУ. 1962, - 508 С.
26. Лебедова В.В. Техника оптической спектроскопии. –М. Изд. МГУ. 1977. -353 С.
27. Раутиан С.Т. Реальные спектральные приборы // Усп. физ. наук. 1958. Т. 66. Вып. 3. С. 475-517
28. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
29. Tukhvatullin F.H., Jumabaev A., Muradov G., Hushvaktov H.A., Absanov A.A. Raman spectra of $C\equiv N$ vibrations of acetonitrile in aqueous and other

- solutions. Experimental results and ab initio calculations // J. Raman spectrosc. 2005. 10 (36). pp. 932-937.
30. Asthana B.P., Deckert V., Shukla M.K., Kiefer W. Isotopic dilution study of self association in ($\text{CH}_3\text{CN}+\text{CD}_3\text{CN}$) mixture by scanning multichannel Raman difference technique and ab-initio calculations // Chem. Phys. Lett. 2000, V. 326, Is. 1-2, pp. 123-128.