

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT  
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJA BERUVCHI  
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI**

**XUDOYBERDIYEVA DILAFRUZ BOYKULOVNA**

**STRUKTURASIGA METIL HAMDA GALOID ELEMENTLARI  
KIRITILGAN SUYUQ MUHIT ATOM VA MOLEKULALARINING LAZER  
NURLANISHI TA’SIRIDAGI TEBRANMA-AYLANMA HARAKAT  
SPEKTROSKOPIYASI**

**01.04.05 – Optika**

**fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
AVTOREFERATI**

**Samarqand – 2025**

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
avtoreferati mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по  
физико-математическим наукам**

**Content of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on  
physical-mathematical sciences**

**Xudoyberdiyeva Dilafruz Boykulovna**

Strukturasiga metil hamda galoid elementlari kiritilgan suyuq muhit atom va molekulalarining lazer nurlanishi ta'siridagi tebranma-aylanma harakat spektroskopiyasi.....3

**Худойбердиева Дилафруз Бойкуловна**

Спектроскопия колебательно-вращательного движения под воздействием лазерного излучения атомов и молекул жидкой среды с метил и галоидозамещёнными элементами.....21

**Khudoyberdieva Dilafruz Boykulovna**

Spectroscopy of the vibration-rotational motion of atoms and molecules of a liquid medium included methyl and holloid elements in its structure under the influence of laser radiation .....39

**E'lon qilingan ilmiy ishlar ro'yxati**

Список опубликованных работ

List of published works.....43

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT  
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJA BERUVCHI  
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI**

**XUDOYBERDIYEVA DILAFRUZ BOYKULOVNA**

**STRUKTURASIGA METIL HAMDA GALOID ELEMENTLARI  
KIRITILGAN SUYUQ MUHIT ATOM VA MOLEKULALARINING LAZER  
NURLANISHI TA‘SIRIDAGI TEBRANMA-AYLANMA HARAKAT  
SPEKTROSKOPIYASI**

**01.04.05 – Optika**

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
AVTOREFERATI**

**Samarqand – 2025**

**Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston respublikasi oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2022.2.PhD/FM723 raqam bilan ro'yxatga olingan.**

Dissertatsiya Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy universitetida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengashning veb-sahifasida (www.samdu.uz) va "Ziyonet" Axborot ta'lim portalida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

**Ilmiy rahbar:**

**Otajonov Shavkat**

fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Rasmiy opponentlar:**

**Azamatov Zakirjan Taxirovich**

fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Murodov G'ulomxon**

fizika-matematika fanlari nomzodi, dotsent

**Yetakchi tashkilot:**

**Islom Karimov nomidagi Toshkent davlat texnika universiteti**

Dissertatsiya himoyasi Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti huzuridagi ilmiy daraja beruvchi PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 raqamli Ilmiy kengashning 2025-yil "27" 02 soat 11<sup>30</sup> dagi majlisida bo'lib o'tadi (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet hiyoboni, 15-uy. Tel.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; faks: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz, Samarqand davlat universiteti Muhandislik fizikasi instituti, 1-qavat, 114-xona).

Dissertatsiya bilan Samarqand davlat universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (11 raqami bilan ro'yxatga olingan). (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet hiyoboni, 15-uy. Tel.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; faks: (99866) 239-11-40).

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil "15" 02 kuni tarqatildi.  
(2025-yil "15" 02 dagi 11 raqamli reyestr bayonnomasi).



**M.X.Ashurov**

Ilmiy darajalar beruvchi  
Ilmiy kengash raisi,  
f.-m.f.d., akademik

**R.M.Rajabov**

Ilmiy darajalar beruvchi  
Ilmiy kengashning ilmiy kotibi,  
f.-m.f.n., dotsent

**D.I.Semenov**

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash  
huzuridagi Ilmiy seminar raisi,  
f.-m.f.d., dotsent

## KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

**Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati.** Jahonning ko'plab mamlakatlarida molekulalararo ta'sirlashuv va uning tabiati hamda kuchini murakkab molekulali kondensirlangan muhitlarda namoyon bo'ladigan optik spektrlarga ta'sirini tadqiq qilishga alohida e'tibor qaratilmoqda. Uning sabablaridan biri molekulalararo ta'sirlashuv qonuniyatlari turli xil fotofizik jarayonlarga o'z ta'sirini o'tkazadi, jumladan, molekulalararo ta'sirlashuv energiyasini uzatilishi bilan bir qatorda kondensirlangan muhitlarning fizik-kimyoviy xossalarini shakllanishida ham o'z o'rniga ega. Shuningdek, ichki molekulyar va molekulalararo ta'sirlashuv jarayonlariga tegishli qonuniyatlarni bilish ma'lum bir maqsadga yo'naltirilgan kimyoviy moddalarni sintez qilishni oldindan bashorat qilish imkoniyatini beradi.

Bugungi kungacha jahon miqyosida amaldagi mavjud nazariy va fundamental ilmiy natijalarga asoslanadigan bo'lsak, moddalarning suyuq holatini tadqiq qilishda muhim ilmiy va amaliy ahamiyatga molik suyuq fazada o'ta kichik vaqt oralig'ida sodir bo'luvchi fizikaviy hamda kimyoviy jarayonlar kinetikasini tadqiq qilish ham o'zining yechimini topmagan. Ko'p atomli murakkab strukturali organik suyuq moddalardagi ichki molekulyar va molekulalararo ta'sirlashuv qonuniyatlari hamda bu qonuniyatlarni optik spektrlarda namoyon bo'lishi bilan bog'liq fikrlar turli xil, hatto qarama-qarshi fikrlar ham mavjud. Fandagi bu muammoni hal etib, suyuq muhitlarning xossalarini to'la aks ettiruvchi molekulyar nazariya yaratish uchun spektroskopik tadqiqotlarni davom ettirishni taqozo etadi. Shuningdek, lazer nurlanishi ta'sirida molekulaning tebranma-aylanma harakati natijasida namoyon bo'ladigan yorug'likning kombinatsion sochilish spektrlarini quyi chastotalar sohasi amaliy ahamiyatga ega bo'lib, ilmiy tadqiqot ishlari chegaralangan va keyingi yillarda deyarli o'rganilmagan.

Respublikamizda oxirgi yillarda ilmiy tadqiqot ishlarining rivojlanishiga, jumladan, farmakologiyada, agrokimyoda va sanoatda keng qo'llaniladigan tarkibi turli benzol hamda piridin hosilali molekulalardan iborat organik suyuqliklarning strukturasidagi o'zgarishlarning optik spektrlarda aks etishi bilan bog'liq tadqiqotlarga katta e'tibor qaratilmoqda. Molekulalararo ta'sirlashuv va uning tabiatini tushunishda muhim ahamiyatga ega bo'lgan, molekula strukturasini hamda struktura o'zgarishidagi spektral xususiyatlarni tadqiq qilish dolzarb vazifalardan biri bo'lib qolmoqda. Ushbu vazifalarni amalga oshirish O'zbekiston Respublikasi Prezidentining aniq maqsadlarga yo'naltirilgan bir qator farmon va qarorlarida o'zining ifodasini topgan.

Jumladan, 2021-yil 19-martdagi PQ-5032-son "Fizika sohasidagi ta'lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora tadbirlari to'g'risida"gi Qarori, 2019-yil 8-oktyabrdagi "O'zbekiston Respublikasi oliy ta'lim tizimini 2030-yilgacha rivojlantirish konsepsiyasi"ni tasdiqlash to'g'risidagi PF-5847-son Farmoni, 2019-yil 17-iyun PQ-4358-son "2019-2023-yillarda Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy universitetida talab yuqori bo'lgan malakali kadrlar tayyorlash tizimini tubdan takomillashtirish va ilmiy salohiyatni rivojlantirish chora-tadbirlari to'g'risida"gi Qarori hamda mazkur faoliyatga oid boshqa me'yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti muayyan darajada xizmat qiladi.

**Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi.** Mazkur tadqiqot ishi respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining II. “Fizika, astronomiya, energetika va mashinasozlik” ustuvor yo‘nalishi doirasida bajarilgan.

**Muammoning o‘rganilganlik darajasi.** Xorijiy, mustaqil davlatlar hamdo‘stligi mamlakatlari hamda O‘zbekiston olimlari tomonidan kondensirlangan muhitlarda sodir bo‘ladigan relaksatsion jarayonlarning kinetikasi, optik xossalari bo‘yicha ilmiy tadqiqot ishlari olib borilgan. Jumladan, xorijda Z.Gu, V.Chen, L.Du, H.Shi va F.Vana (Xitoy), G.Shakila, S.Periandi va S.Ramalingam (Hindiston), Kirill Juravlev, Katrina Traikov, Jaohui Dong va Yang Song (Amerika), A.Onal, M.Okur (Turkiya), MDH mamlakatlaridan A.V.Sechkarev, N.G.Baxshiyev, V.S.Gorelik, N.G.Torgunakov, V.S.Ctarunov, I.L.Fabelinskiy (Rossiya), L.A.Bulavin, I.Y.Doroshenko, V.Ye.Pogorelov (Ukraina), B.N.Narziyev, A.A.Adhamov, V.M.Korovina (Tojikiston), U.N.Tashkenbayev, L.M.Sobirov, A.Jumabayev, A.Hushvaqto‘v, A.Absanov, B.Quyliyev, Sh.Otajonov, B.Eshchanov, M.Alijonov (O‘zbekiston) ushbu sohada fundamental va amaliy ahamiyatga molik ilmiy tadqiqot ishlari olib borilgan.

Ushbu tadqiqot natijalari asosida molekulalararo ta’sirlashuv qonuniyatlarini tadqiq qilish asosida relaksatsion jarayonlarning bir qator fizik kattaliklari aniqlangan.

Jumladan, transformator yog‘ida erigan atsetonning kombinatsion sochilish (KS) spektri quyi chastotalar sohasidagi  $780 \text{ cm}^{-1}$  xarakterli spektral chizig‘ining haroratga bog‘liqligi tadqiq qilingan. Benzol strukturasi brom va xlor kiritilgan 1-brom-2-xlorbenzol moddasi uchun KS, infraqizil (IQ) spektrlari  $100\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$  chastotalar sohasida qayd etilgan va HF/DFT (B3LYP) usuli yordamida nazariy hisoblangan tebranish chastotalari bilan taqqoslanib, benzolning ayrim tebranish chastotalariga galoid almashtirishlar kuchli ta’sir etishi aniqlangan. Piridin suyuqligining strukturaviy o‘tishlari, KS va IQ yutilish spektrlari yordamida 26 GPa gacha bo‘lgan bosimdagi xususiyatlari o‘rganilgan bo‘lib, bu o‘tishlarda spektr konturlarining intensivligi o‘zgarishi va tebranish spektrlari soni turli diapazonlardagi bosimga bog‘liqligi aniqlangan. 4-fenilbutalamin molekulasining to‘rtta barqaror izomerlari IQ ( $400\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$ ) va KS ( $60\text{--}3700 \text{ cm}^{-1}$ ) spektrlari orqali eksperimental hamda B3LYP/6-311++G(d,p) yaqinlashishlar bilan nazariy o‘rganilgan bo‘lib, eksperimental va nazariy ma’lumotlar natijasida 4-fenilbutilamin molekulasining eng barqaror shakli olingan. Noemperik hisoblashlar natijasida molekulyar komplekslarni shakllanishida O – H...O, N – H...O, O – H...N kabi vodorod bog‘lanishlar asosiy sabablardan biri ekanligi o‘rganilgan. Molekulaning erkinlik darajalari bo‘yicha aylanma harakatidan hosil bo‘lgan optik spektrlarning natijalovchi spektrlarga ulushi aniqlangan bo‘lib, mavjud nazariya bilan solishtirilgan.

**Tadqiqotning dissertatsiya bajarilgan oliy ta’lim muassasasining ilmiy tadqiqot ishlari rejalari bilan bog‘liqligi.** Dissertatsiya tadqiqoti O‘zbekiston Milliy universiteti, Samarqand davlat universiteti hamda Kiyev milliy universitetlari bilan o‘zaro hamkorlikdagi FZ-20200929385 “Biologik obyektlarning nanoo‘lchamli molekulyar klasterlarini o‘rganish va tatbiq qilishning spektroskopik hamda noemperik tahlil usullarini ishlab chiqish” mavzusidagi (2022-2027-yy.) davlat ilmiy-texnika dasturlari doirasidagi fundamental loyiha hamda Mirzo Ulug‘bek nomidagi

O‘zbekiston Milliy universiteti ilmiy tadqiqot ishlarining “Kondensirlangan muhitlardagi relaksatsion jarayonlarni spektroskopik usullar bilan tadqiq qilish” ochiq rejaları doirasida bajarilgan.

**Tadqiqotning maqsadi.** Strukturasiğa metil va galoid elementlari kiritilgan suyuq muhitlar tarkibidagi atom hamda molekularning lazer nurlanishi ta’siridagi tebranma va aylanma harakat qonuniyatlarini spektroskopik usullar bilan tadqiq qilishdan iborat.

**Tadqiqotning vazifalari:**

molekularning erkinlik darajalari bo‘yicha aylanma harakati bilan bog‘liq bo‘lgan optik spektrlarni tadqiq qilish va olingan natijalar asosida relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini xarakterlovchi fizik parametrlarni aniqlash;

molekularning erkinlik darajalari bo‘yicha aylanma harakatidan hosil bo‘ladigan optik spektrlarni natijalovchi spektrlarga ulushini aniqlash;

suyuqlik molekularining o‘zaro korelyatsiyasi (yaqin tartib) qonuniyatlarini tadqiq qilish;

benzol va piridin halqasiga (strukturasiğa) kiritilgan turli xil tabiatli funksional guruhlarning optik spektrlarga ta’sirini aniqlash;

quyi chastotalar sohasidagi optik spektrlarning namoyon bo‘lish qonuniyatlarini tadqiq qilish;

kvant-kimyoviy nazariy hisoblashlar yordamida molekularning tarkibidagi atomlarning bog‘lanish uzunliklari, bog‘lanishlar orasidagi burchaklarni va xususiy tebranish chastotalarini aniqlash.

**Tadqiqotning obyekti** sifatida benzol va piridin strukturasiğa metil, amin va galoid kabi funksional guruhlar kiritilgan 6 ta organik moddalarning molekulari tanlab olingan.

**Tadqiqotning predmeti** ko‘p atomli molekularning lazer nurlanishi ta’siridagi xossalari, molekularning tebranma-aylanma harakati qonuniyatlarini, molekulararo ta’sirlashuv jarayonlarini va muhit temperaturasi optik spektrlarga ta’sirini o‘rganishdan iborat.

**Tadqiqotning usullari.** Tadqiqot ishida yorug‘likning molekulyar sochilish, kombinatsion sochilish, infraqizil yutilish spektroskopiya hamda kvant-kimyoviy modellashtirish usullari qo‘llanilgan.

**Tadqiqotning ilmiy yangiligi** quyidagilardan iborat:

lazer nurlanishi ta’sirida molekulaning erkinlik darajalari bo‘yicha aylanma harakatidan hosil bo‘ladigan yorug‘likning molekulyar sochilish spektrini natijalovchi spektrga ulushini aniqlash usuli ishlab chiqilib, uning asosida relaksatsion jarayonlarning asosiy fizik parametrlari aniqlangan va molekulaning tormozlanib harakatlanish nazariyasi asosida tushuntirilgan;

ilk bor xlorbenzol, brombenzol va o-dibrombenzol molekularining C-H valent tebranishlari bilan bog‘liq KS spektral chizig‘i benzol halqasida o‘rin almashgan galoid guruhidagi atomlarning rezonans ta’siri tufayli yuqori chastota tomonga siljishi aniqlangan;

ilk bor anilin molekulasi C-H valent tebranishlari bilan bog'liq KS spektral chizig'i benzol halqasida o'rin almashgan amin NH<sub>2</sub> guruhining konjugatsiya ta'siri sababli quyi chastotalar tomon siljishi aniqlangan;

ilk bor benzol hosilalari molekulasi strukturasi C-H bog'larining tekislikdagi deformatsion tebranishlari amplitudasi o'rin almashgan atomlar elektromanfiyligiga sezgirligi aniqlangan;

ilk bor murakkab strukturaga ega bo'lgan molekular tarkibidagi atomlar guruhining aylanma-chayqalma harakati natijasida quyi chastotalarda ham kuchli intensivlikka ega bo'lgan KS spektrlarini namoyon bo'lishi tajribada aniqlangan. Bu esa nafaqat fundamental, balki amaliy ahamiyatga ham ega bo'lib, alohida atomlarning tebranishidan hosil bo'ladigan majburiy kombinatsion sochilish effektini ham tadqiq qilishni ochib berishini bilan birga termodinamik kattaliklarni aniqlash hatto makromolekulalarning molyar massasini hisoblash imkoniyatini berishi mumkinligi ko'rsatilgan;

metil guruhiga kiruvchi yengil atomli molekularning aylanma-chayqalma harakatidan hosil bo'ladigan spektrlarning chastotalari, galoid guruhiga kiruvchi og'ir atomli molekularning harakatiga nisbatan keskin farq qilishi aniqlangan. Bu esa molekularning inersiya momenti qiymatlariga bog'liq ekanligi bilan tushuntirilgan.

**Tadqiqotning amaliy natijasi** quyidagilardan iborat:

Anizotroplikning fluktuatsiyasi hisobiga yorug'likning molekulyar sochilish spektrining namoyon bo'lish mexanizmlari ishlab chiqilgan bo'lib, molekularning erkinlik darajalari bo'yicha aylanma harakatidan hosil bo'ladigan spektrlarni natijalovchi spektriga ulushini va relaksatsion jarayonlarning molekulyar parametrlarini aniqlash usuli ishlab chiqildi. Bu usuldan spektroskopik tadqiqotlarda foydalanish mumkin;

Molekula strukturasi o'rin almashgan atom va guruhlarining tabiati bilan bog'liq KS spektridagi o'zgarishlarning tahlil natijalaridan spektral analizda ingradiyentlarni identifikatsiya qilishda foydalanish mumkin;

Quyi chastotalar oralig'ida molekularning aylanma-chayqalma harakati bilan bog'liq spektrlarni namoyon bo'lishi asosida majburiy kombinatsion sochilish spektrini ham kuzatish mumkinligi aniqlanib, bu bir qator termodinamik kattaliklarni hisoblash imkoniyatini beradi.

**Tadqiqot natijalarining ishonchligi** tadqiqotda zamonaviy eksperimental qurilma hisoblangan InVia Raman spektrometri hamda Spectrum Two FT-IR spektrometrlardan foydalanilganligi, Respublika va xalqaro ilmiy-amaliy anjuman materillari, OAK ro'yxatiga kiritilgan va boshqa xorijiy ilmiy jurnallarda chop etilgan maqolalar (Scopus), xulosa va tavsiyalarni vakolatli tashkilotlar tomonidan tasdiqlanganligi bilan izohlanadi.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.** Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati ko'p atomli molekular tarkibidagi o'zaro yaqin bo'lgan atomlarning korelyatsiyasi kattaligini o'rganish, molekulararo ta'sirlashuv qonuniyatlarini optik spektrlarda namoyon bo'lishi, relaksatsion jarayonlar kinetikasini tadqiq qilish asosida molekularning strukturaviy holatini real tasavvur qilish va bu ilmiy natijalarni mukammal molekulyar nazariya yaratish imkonini berish bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarini amaliy ahamiyati benzol yoki piridin halqasidan tashkil topgan molekula tarkibiga metil va galoid atomlari mavjud qonuniyatlar bilan kiritilganda yorug'likning molekulyar hamda kombinatsion sochilish spektrlariga ta'sirini o'rganishdagi ilmiy natijalar ma'lum bir maqsadga yo'naltirilgan kimyoviy moddalarni sintez qilish va ishlab chiqishga xizmat qiladi.

Tadqiqot obyektlari uchun yorug'likning kombinatsion sochilish spektrlari bo'yicha olib borilgan kvant-kimyoviy hisoblashlar asosidagi natijalar atomlarning o'zaro bog'lanish energiyasi, bog'lanish uzunligi hamda atomlar orasidagi burchaklarni aniqlash usullari tavsiya etilgan bo'lib, molekulyar nazariya yaratish imkoniyatini beradi.

**Tadqiqot natijalarining amaliyotga joriy qilinishi.** Tadqiqot obyekti sifatida tanlangan metil va galoid guruhlari tarkibiga kiruvchi organik moddalardagi molekulalararo ta'sirlashuv qonuniyatlarini tadqiq qilishga asoslangan ilmiy natijalar asosida:

yorug'likning molekulyar va kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektrlarini tahlili asosidagi natijalar Chirchiq davlat pedagogika universitetida olib borilayotgan ilmiy tadqiqot ishlarini bajarishda foydalanib kelinmoqda.

Xususan, lazer nurlanish ta'sirida quyi chastotalar oralig'ida namoyon bo'ladigan molekulalarning tebranma-aylanma harakatlari bilan bog'liq bo'lgan energiya kattaligini yorug'likning kombinatsion sochilish spektri yordamida hisoblash usulidan REP-04032022-206 raqamli "Optoelektron tarmoqlarda optik garmonika paydo bo'lishi va soliton tarqalishi jarayonlarini boshqarish" (2022-2024-yy.) mavzusidagi halqaro ilmiy loyihada muhitlarda ikkinchi hamda undan yuqori garmonikalarni hosil bo'lish qonuniyatlarini tahlil qilishda va solitonlar tarqalayotgan muhitning termodinamik parametrlarini aniqlashda foydalanilgan (Chirchiq davlat pedagogika universitetining 2024-yil 5-fevraldagi №01/260-sonli ma'lumotnomasi);

Molekulalarning energetik sathlardagi faollashuv energiyasini noemperik usul bilan aniqlash hamda kvant-kimyoviy hisoblashlarga asoslangan molekulaning fazoviy strukturasi modellash usullari FZ-20200929385 raqamli "Biologik obyektlarning nanoo'lchamli molekulyar klasterlarini o'rganish va tatbiq qilishning spektroskopik hamda noemperik tahlil usullarini ishlab chiqish" (2022-2027-yy.) mavzusidagi davlat ilmiy-texnika dasturidagi fundamental loyihada molekulyar komplekslarning hosil bo'lish mexanizmlarini hamda termodinamik barqarorligini aniqlashda qo'llanilgan (Sh.Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining 2024-yil 15-maydagi №10-2255-sonli ma'lumotnomasi);

Katta hajmda bayon qilingan nazariy va eksperimental natijalar Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy universiteti Fizika fakulteti Fotonika kafedrasidagi 70530901-Fizika (yo'nalishlar bo'yicha) magistratura mutaxassisligi talabalari uchun "Lazer nurlanishlarning muhitlar bilan o'zaro ta'sirlashuvi", maxsus kursining ishchi o'quv dasturiga singdirilgan bo'lib, ma'ruza va seminar mashg'ulotlarida foydalanilmoqda. Bular jumlasiga molekulalarning erkinlik darajalari bo'yicha tormozlanib harakatlanish nazariyasi, bugungi kungacha deyarli o'rganilmagan molekulalarning aylanma-chayqalma harakatiga tegishli qonuniyatlar o'quv mashg'ulotlarini zamonaviy optik qurilmalarda olingan natijalar bilan boyitilishiga

xizmat qilgan (Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universitetining 2024-yil 21-maydagi №04/11-4441-sonli ma‘lumotnomasi).

**Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi.** Dissertatsiyaning tadqiqot natijalari 3 ta xalqaro va 6 ta respublika ilmiy amaliy konferensiyalarda muhokamadan o‘tkazilgan.

**Tadqiqot natijalarining e‘lon qilinganligi.** Tadqiqot mavzusi bo‘yicha jami 16 ta ilmiy ish, jumladan, O‘zbekiston Respublikasi Oliy Attestatsiya Komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasining asosiy ilmiy natijalarini chop etish uchun tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 7 ta maqola (5 tasi Respublika miqyosidagi, 1 tasi Scopus ma‘lumotlar bazasidagi va 1 tasi xalqaro jurnallarda) chop etilgan.

**Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi.** Dissertatsiya tarkibi kirish, to‘rtta bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatidan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 139 betni tashkil qilgan bo‘lib, 46 ta rasm va 19 ta jadvalni o‘z ichiga olgan.

## DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Dissertatsiyaning **“Kirish”** qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati asoslangan bo‘lib, tadqiqotning respublika fan va texnika taraqqiyotining asosiy ustuvor yo‘nalishlari bilan bog‘liqligi ko‘rsatilgan, muammoning o‘rganilganlik darajasi, tadqiqotning dissertatsiya bajarilgan oliy ta‘lim muassasasining ilmiy tadqiqot ishlari rejaları bilan bog‘liqligi, tadqiqotning maqsadi, vazifalari, usullari, tanlangan obyektlar, predmeti va tadqiqotning ilmiy yangiligi ko‘rsatilgan, tadqiqotning amaliy natijasi va natijalar ishonchliligining asoslanganligi, ularning ilmiy va amaliy ahamiyati, amaliyotga joriy qilinishi, ishning aprobatsiyasi, natijalarning e‘lon qilinishi haqida ma‘lumotlar bilan birgalikda dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi keltirilgan.

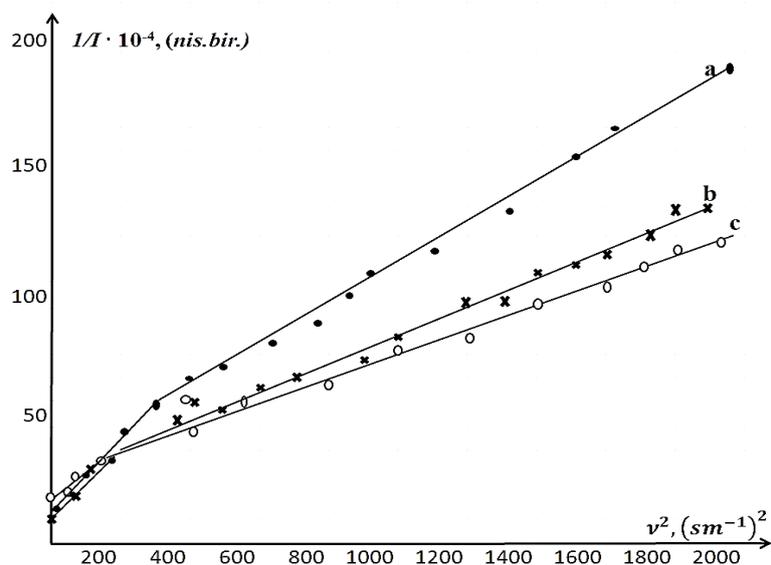
Dissertatsiyaning **“Ko‘p atomli molekulalardan tashkil topgan suyuq fazalardagi molekulalararo ta‘sirlashuv qonuniyatlarini o‘rganishda spektroskopik tadqiqotlarning o‘rni. Yechim va muammolar”** nomli birinchi bobida suyuqliklarda yorug‘likning molekulyar sochilish (MS) va KS spektrlarining nazariy hamda amaliy tadqiqotlar natijalariga doir adabiyotlar sharhi keltirilgan. Yorug‘likning MS spektrining nozik strukturasi (Mandelshtam-Brillyuen) qonuniyatlari va molekulalararo ta‘sirlashuvlarni spektrlarga ta‘siri masalalari ko‘rib chiqilgan. Flukuatsiyaning izotrop va anizotrop tashkil etuvchilari bilan bog‘liq yorug‘likning molekulyar sochilish spektrini namoyon bo‘lish mexanizmlari hamda modda strukturasi molekulyar sochilish spektrlari yordamida o‘rganish bo‘yicha adabiyotlarda keltirilgan ma‘lumotlar tahlil qilingan. Molekula strukturasi o‘zgarishlarni, ichki va molekulalararo ta‘sirlashuvlarning KS spektrlariga ta‘sirini o‘rganishga bag‘ishlangan ishlar tahliliga doir ma‘lumotlar keltirilgan bo‘lib, bunday ma‘lumotlar dissertatsiya ishini maqsadi va vazifalarini belgilashda, uni amalga oshirish va olingan natijalarni tahlil qilishda muhim rol o‘ynaydi.

Dissertatsiyaning **“Tarkibiga metil va galoid atomlari kiritilgan organik moddalar strukturasi tadqiq qilishning eksperimental metodlari”** deb nomlangan ikkinchi bobida tadqiqot obyektlari va ularning asosiy fizik-kimyoviy xossalari haqida ma‘lumotlar hamda toza namunalarni tayyorlash metodikasi keltirilgan. Tadqiqot obyektlari sifatida galoid va metil almashtirilish bo‘yicha turli xarakterli benzol hamda piridin halqali modda molekulalari tanlangan. Yorug‘likning

MS, KS va IQ yutilish spektrlarini eksperimental qayd qilish usullari hamda tajriba texnikasi bayon qilingan. Tadqiqotda foydalanilgan ДФС-12 difraksion panjarali spektrometr qurilmasi, In Via Raman va Spectrum Two FT-IR spektrometrlari ishlash prinsipining hamda ularga tegishli asosiy parametrlari to'g'risida ma'lumotlar berilgan. Tadqiq etilayotgan organik moddalar molekulalarining geometrik parametrlarini va molekula tarkibidagi atomlarning xususiy tebranish chastotalarini kvant-kimyoviy nazariy hisoblashda foydalanilgan Xartri-Fok metodi haqida ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning uchinchi bobi **“Qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha asimmetrik bo'lgan kondensirlangan muhitlardagi molekulalararo ta'sirlashuv qonuniyatlarini anizotroplikning fluktuatsiyasi hisobiga sodir bo'ladigan yorug'likning MS spektrida namoyon bo'lishi”**ga bag'ishlangan bo'lib, elektromagnit to'lqin nurlanishi ta'sirida molekulalarning erkinlik darajalari bo'yicha aylanma harakati bilan bog'liq fizik parametrlarni aniqlash metodikasi, molekulasi qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha asimmetrik bo'lgan suyuqliklar uchun eksperimental olingan MS spektrining hosil bo'lish qonuniyatlarini aniqlash bo'yicha tadqiqot natijalari keltirilgan.

Muhitlardagi anizotroplikning fluktuatsiyasi hisobiga hosil bo'lgan MS spektri muhit strukturasi tahlil qilishda, relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini o'rganishda fundamental va amaliy ahamiyatga ega. Molekulaning aylanma harakati qonuniyatlarini o'rganish maqsadida molekulasi qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha asimmetrik bo'lgan piridin, brombenzol va anilin kabi suyuqliklar uchun turli temperaturalarda, chastotaning  $0-60 \text{ sm}^{-1}$  oralig'ida eksperimental olingan MS spektrlari tahlil qilindi. Misol sifatida piridin molekulasi uchun 3 xil temperatura bo'yicha spektral intensivlikni chastotaga bog'liqlik taqsimoti 1-rasmda keltirilgan. Molekulalarning erkinlik darajalari bo'yicha tormozlanib harakatlanish nazariyasiga ko'ra, muhitni tashkil etgan molekulalar qutblanuvchanlik tenzorlari bo'yicha asimmetrik bo'lsa MS spektri 3 ta tashkil etuvchidan, ya'ni  $1/I \sim (\nu^2)$  bog'lanish grafigi uch qismdan tashkil topgan bo'ladi. Molekulaning erkinlik darajalariga mos keluvchi piridin molekulasi qutblanuvchanlik tenzorining qiymatlari bir-biridan farq qilib, quyidagi qiymatlarni qabul qiladi:  $a_\zeta = 118,8 \cdot 10^{-25} \text{ sm}^3$ ,  $a_\eta = 57,8 \cdot 10^{-25} \text{ sm}^3$ ,  $a_\xi = 108,4 \cdot 10^{-25} \text{ sm}^3$ . Bunga asosan chastotaning ma'lum bir oralig'ida piridin molekulasi har bir o'qlar atrofida aylanma harakatidan hosil bo'ladigan spektr  $1/I \sim (\nu^2)$  bog'lanish grafigida 3 ta tashkil etuvchidan iborat bo'lish kerak. Lekin tajriba natijalariga ko'ra, chastotaning  $0-60 \text{ sm}^{-1}$  oralig'ida 2 ta tashkil etuvchidan, ya'ni spektral kengligi “tor” va “keng” (mos ravishda  $\sigma_1$  va  $\sigma_2$ ) bo'lgan 2 ta lorents konturlaridan iborat ekanligi aniqlandi.  $60 \text{ sm}^{-1}$  dan boshlab keyingi yuqori chastotalarda MS spektrining intensivligi keskin kamaygan. Ushbu tafovutni molekulalarning erkinlik darajalari bo'yicha tormozlanib harakatlanish nazariyasidan foydalanib tushuntirish mumkin.



**1-rasm.** Piridin molekulasini uchun turli temperaturalar bo'yicha spektral intensivlikni chastotaga bog'liqlik taqsimoti: a) 20 °C, b) 50 °C, c) 80 °C.

Molekulalarning tormozlanib harakatlanish nazariyasiga asosan MS spektri konturining tarkibini murakkabligi ko'rsatilib, molekulalarning harakatini erkinlik darajalari bo'yicha uchta o'zaro kuchsiz bog'langan tormozlangan aylanma harakatidan iborat deb qaraladi. Molekulalarning erkinlik darajalari atrofidagi aylanma harakatining tormozlanish darajasi turlicha bo'ladi. Chunki molekulalarning har bir inersiya o'qlari atrofidagi shakli va ichki maydoni anizotropiysi turlicha. Bu esa molekulaning har bir o'qlarga nisbatan aylanma harakati natijasidagi MS spektri intensivligining ma'lum bir qiymatini hosil bo'lishiga olib keladi.

Tajribadan olingan natijalar asosida piridin molekulasining molekulyar  $\zeta$ ,  $\eta$ , va  $\xi$  o'qlar atrofidagi aylanma harakatini tahliliga ko'ra, 1- a) rasmning 0-17  $\text{sm}^{-1}$  chastota oralig'iga to'g'ri keluvchi 1-konturning (ya'ni kengligi  $\sigma_1$  tor bo'lgan kontur) hosil bo'lishi piridin molekulasining  $\eta$  o'qi atrofida tormozlanib harakatlanishi bilan bog'liq bo'ladi. 1-konturning spektral kengligi tor bo'lishiga sabab,  $\sigma_1 \sim 1/\tau_1$  bo'lganligi uchun ( $\tau$ -relaksatsiya vaqti) piridin molekulasining  $\eta$  o'qi atrofida aylanishi uchun ketgan relaksatsiya vaqti katta bo'lgan, chunki bu o'q atrofida harakati erkin bo'lmasdan, balki tormozlanib harakatlangan. 17-60  $\text{sm}^{-1}$  chastota oralig'idagi konturning hosil bo'lishi esa molekulaning  $\zeta$  o'qi atrofidagi aylanma harakati natijasi bo'lib, bu o'q atrofida molekulaning harakati o'qqa nisbatan erkin bo'lganligi uchun  $\tau$  kichik qiymatni qabul qiladi, bu esa  $\sigma_2 \sim 1/\tau_2$  ekanligidan 2-konturning spektral kengligi  $\sigma_2$  ning qiymati katta bo'lishiga olib keladi. Molekulaning  $\xi$  o'qi atrofida aylanishidan hosil bo'ladigan spektr to'g'risida molekulalarning tormozlanib harakatlanish nazariyasiga asoslangan holda va shu spektrning natijalovchi spektrga ulushi  $\alpha_\xi$  ni nazariy hisoblangan qiymatiga ko'ra xulosa chiqarish mumkin.

Molekulalarning tormozlanib harakatlanish nazariyasiga asosan piridin molekulasining har bir erkinlik darajalari bo'yicha molekulaning aylanma harakatidan hosil bo'ladigan spektrlarning natijalovchi spektrga ulushi quyidagi tenglama orqali aniqlanadi:

$$\alpha_i = \frac{(a_k - a_j)^2}{2g^2} \quad (1)$$

$$g^2 = \frac{1}{2} \left[ (a_\zeta - a_\eta)^2 + (a_\eta - a_\xi)^2 + (a_\xi - a_\zeta)^2 \right] \quad (2)$$

Ushbu formuladagi  $g^2$  – molekullarning anizotroplik darajasi,  $a$  – qutblanuvchanlik koeffitsiyentlari,  $i = \zeta, \eta, \xi$  qiymatlarni qabul qiladi. Piridin molekulasining o‘qlar bo‘yicha taqsimotini (1) tenglama orqali quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\alpha_\zeta = \frac{(a_\zeta - a_\eta)^2}{2g^2}, \quad \alpha_\eta = \frac{(a_\eta - a_\xi)^2}{2g^2}, \quad \alpha_\xi = \frac{(a_\xi - a_\zeta)^2}{2g^2} \quad (3)$$

(3) tenglamalarga asosan qutblanuvchanlik tenzorlari  $a_\zeta$ ,  $a_\eta$  va  $a_\xi$  ning hamda anizotroplik darajasi  $g^2$  ning qiymatlarini bilgan holda piridin molekulasining har bir o‘q atrofida aylanishidan hosil bo‘lgan MS spektrlarning, natijalovchi tajribada kuzatilgan spektrga ulushlarini nazariy hisoblashimiz mumkin. Nazariy hisoblashlarga asosan:  $\alpha_\zeta = 0,58$ ,  $\alpha_\eta = 0,4$ ,  $\alpha_\xi \approx 0,02$  yoki  $\alpha_\zeta + \alpha_\eta + \alpha_\xi = 1$  qiymatlarga teng.

Spektr ulushining ushbu qiymatlaridan ko‘rinadiki, piridin molekulasining  $a_\xi$  o‘qi atrofida molekullarning aylanma harakatidan hosil bo‘ladigan sochilish spektrining natijalovchi spektrga ulushi 0,02 ga teng bo‘lib, umumiy spektrning 2 %ini tashkil qildi xolos, bundan shunday xulosa chiqadiki, tajribada qo‘llanilgan eksperimental qurilmamizning sezgirliigi ushbu kichik qiymatni o‘lchash imkoniyatiga ega bo‘lmadi. Shuning uchun 1-rasmdagi grafik ikkita lorents konturining yig‘indisidan iborat bo‘ldi. Spektrlarning tahlili shuni ko‘rsatadiki, muhitning temperaturasi o‘zgarib borishi bilan piridin molekulasining  $\eta$  o‘qi atrofida aylanma harakatini xarakterlovchi relaksatsiya vaqti  $\tau_1$ , temperatura oshishi bilan kamayib boradi, ya’ni  $\tau_1 = 2,5 \cdot 10^{-12} \text{ s}$  dan  $1,1 \cdot 10^{-12} \text{ s}$  gacha kamayishi kuzatildi. Ushbu qonuniyatni molekullarni tormozlanib harakatlanish nazariyasi asosida tushuntirishimiz mumkin. Jumladan, muhit temperaturasi oshishi bilan molekulaning  $\eta$  o‘qi atrofida aylanma harakati tezlashadi, bu esa molekulaning  $\eta$  o‘qi atrofida aylanish uchun ketgan vaqti  $\tau_1$  ni kamayishiga olib keladi. Natijada shu o‘q atrofida molekulaning aylanma harakatidan hosil bo‘lgan spektrning kengligi  $\sigma_1$  oshib boradi, ya’ni  $\sigma_1 = 2,1 \text{ sm}^{-1}$  dan  $4,8 \text{ sm}^{-1}$  gacha oshib borishi kuzatildi.

Muhitning anizotrop molekullarini broun harakati natijasida zichlik fluktuatsiyalaridan tashqari anizotrop molekullarning joylashishining fluktuatsiyalari, ya’ni anizotrop fluktuatsiyalari ham paydo bo‘ladi. Bu esa molekullar harakatining statistik xarakterda bo‘lishi natijasida yorug‘likning to‘lqin uzunligiga nisbatan kichik bo‘lgan hajmlarda biror yo‘nalishda har qanday boshqa yo‘nalishlardagiga qaraganda bir xil joylashgan molekullar soni ko‘p bo‘lib qolganini bildiradi. Anizotropiya fluktuatsiyalarining vujudga kelishida molekulani tebranma (juda kichik amplitudali tebranishlar) harakatining hissasini ham e’tiborga olish kerak bo‘ladi. Xususan, molekulaning tebranma harakatlari ta’siri natijasidagi fluktuatsiyalar MS spektrining anizotrop tashkil etuvchisini hosil bo‘lishida o‘z hissasini qo‘shishi kerak. Anizotrop molekullarning tebranma harakatlarining hissasini nazariy hisoblangan va ma’lum

temperaturadagi eksperiment asosida topilgan spektral konturlarning ulushi qiymatlarini bilgan holda hisoblash mumkin:

$$\alpha_{ayl.} = \frac{1}{1+\gamma}, \quad \alpha_{teb.} = \frac{\gamma}{1+\gamma} \text{ ga teng bo'lib, } \gamma = \frac{1}{\alpha_2^{naz.}} \left( \frac{\alpha_1^{naz.}}{\alpha_1^{eksp.}} - 1 \right) \quad (4)$$

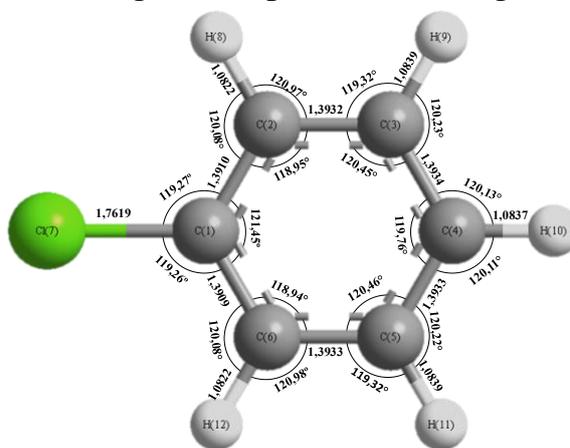
Piridin uchun  $\alpha_{ayl.}$  va  $\alpha_{teb.}$  hissalarini qiymatlari turli temperaturalarda hisoblanib, quyidagi natijalar olindi: 20÷150 °C oralig'ida aylanma harakat  $\alpha_{ayl.}$  hissasi 0,91 dan 0,52 qiymatga kamayib borgan. Tebranma harakat  $\alpha_{teb.}$  hissasi esa 0,09 dan 0,47 qiymatga oshib borgan. Bu natijalar va ilmiy adabiyotlardagi benzol uchun kritik temperaturada olingan tajriba natijalariga ko'ra, anizotrop xossasiga ega bo'lgan muhit temperaturasi oshib borishi bilan, izotropik xossasini namoyon qila boshlaydi deb taxmin qilish mumkin.

Dissertatsiyaning to'rtinchi bobi **“Tarkibiga metil va galoid birikmalari kiritilgan organik uglevodorodlarda yorug'likning KS hamda IQ yutilish spektrlarining namoyon bo'lish mexanizmlari”**ga bag'ishlangan bo'lib, benzol va piridin hosilalari strukturasiidagi o'rin almashgan turli xil tabiatli funksional guruhlarning molekulani KS spektriga ta'sirini IQ yutilish spektrlari va kvant-kimyoviy nazariy hisoblashlar yordamida tadqiq qilish natijalari keltirilgan.

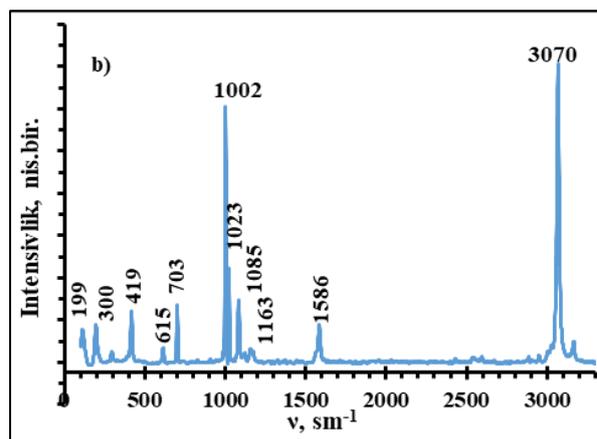
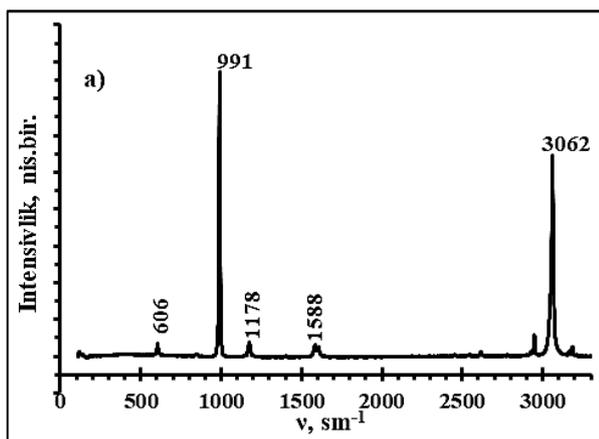
Benzol halqasiga bitta vodorod atomi o'rniga kiritilgan galoid xlor atomining KS spektriga ulushini, spektrning o'zgarishiga olib keluvchi va qo'shimcha hosil bo'lgan spektrlarni namoyon bo'lish qonuniyatlarini aniqlash maqsadida xlorbenzol suyuqligida eksperimental hamda nazariy tadqiqotlar o'tkazildi. Xlorbenzol molekulasi strukturasiining modeli 2-rasmda ko'rsatilgan. 3-rasmda xlorbenzol va etalon sifatida olingan benzolning eksperimental olingan KS spektri tasvirlangan.

Tadqiqot natijalari tahliliga ko'ra, xlorbenzol molekulasi uchun C-H simmetrik valent tebranishlari bilan bog'liq bo'lgan spektral chiziq eksperimental KS spektrida 3070  $\text{sm}^{-1}$  chastotada kuzatildi. Benzolning KS spektri bilan solishtirilganda +8  $\text{sm}^{-1}$  qiymatga yuqori chastota tomon siljiganligi aniqlandi. Spektral chiziqning bunday siljishi atomlar orasidagi kuch konstantasining ortishi natijasidir. 1-jadval tahlilidan ko'rinadiki, xlorbenzol C-H bog'i

uzunligi benzol C-H bog'lari uzunligidan biroz kamaygan. Masalan, C-Cl bog'lanishlariga qo'shni C<sub>2</sub>-H<sub>8</sub> va C<sub>6</sub>-H<sub>12</sub> bog'lari orasidagi uzunlik kamayishi qiymati 0,0025 Å (0,23 %)ga teng. Bizning fikrimizcha, yuzaga kelgan molekula ichidagi kuch konstantalarining o'zgarishiga aromatik halqaga kiritilgan xlor atomini, rezonans ta'sirlashuvi sabab bo'lgan.



**2-rasm.** Xlorbenzol molekulasi strukturasiining modeli.



**3-rasm.** Eksperimental olingan KS spektrlari: a) benzol, b) xlorbenzol.

C-Cl valent tebranishlari bilan bog‘liq spektral chiziq quyi chastotalar sohasida hosil bo‘lishi lozim, chunki C-Cl bog‘i uzunligi C-H bog‘i uzunligidan 0,6797 Å (68 %)ga uzunroq va bu kuch konstantasining kamayishiga olib keladi. Xlor elektromanfiyligi yuqori atom bo‘lganligi tufayli C-Cl bog‘i qutblanadi, bu dipol momentining qiymatini o‘zgarishi esa IQ yutilish spektrida intensivligi yuqori bo‘lgan spektral chiziqning kuzatilishiga olib keladi.

### 1-jadval.

Benzol va xlorbenzol molekulasida atomlari orasidagi nazariy hisoblangan bog‘ uzunligi ( $r$ , Å) va ularni solishtirish natijalari

Molekula	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	C <sub>6</sub> -H <sub>7</sub> , C <sub>1</sub> -H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> -H <sub>8</sub>	C <sub>3</sub> -H <sub>9</sub>	C <sub>4</sub> -H <sub>10</sub>	C <sub>5</sub> -H <sub>11</sub>	C <sub>6</sub> -H <sub>12</sub>
Benzol - C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	1,3939	1,3939	1,3938	1,3939	1,3939	1,3938	1,0845	1,0847	1,0845	1,0845	1,0847	1,0845
Xlorbenzol- C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	1,3910	1,3932	1,3934	1,3933	1,3933	1,3909	1,7619	1,0822	1,0839	1,0837	1,0839	1,0822
$\Delta$ , %	-0,2	-0,04	-0,03	-0,04	-0,04	+0,007	+68	-0,23	-0,05	-0,07	-0,07	-0,21

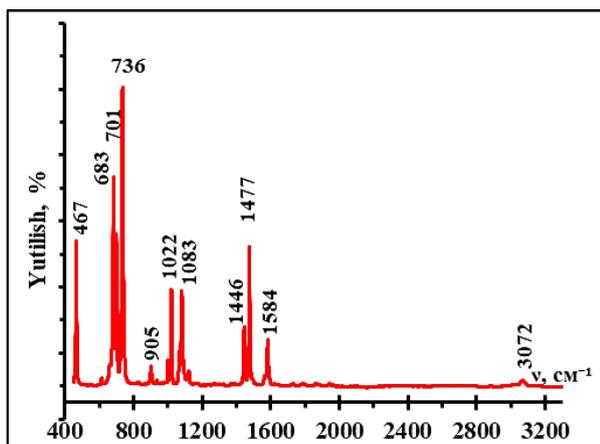
Bu xulosamiz to‘g‘riligini tekshirish uchun yana eksperimentlar davom ettirilib, xlorbenzol molekulasida uchun IQ yutilish spektrlari olindi. 4-rasmda xlorbenzol IQ yutilish spektri tasvirlangan. Rasmdan ko‘rinadiki, intensivligi eng yuqori bo‘lgan spektral chiziq 736  $\text{cm}^{-1}$  chastota qiymatga to‘g‘ri kelib, bu spektrning hosil bo‘lishi C-Cl valent tebranishlari bilan bog‘liq ekanligi aniqlandi. KS spektrida C-Cl valent tebranishlariga tegishli spektral chiziq kuzatilmaganligiga sabab molekulaning qutblanuvchanligi qiymati o‘zgarmaganligini anglatadi.

KS spektridagi qo‘shimcha hosil bo‘lgan 1085 va 1023  $\text{cm}^{-1}$  chastota qiymatli spektral chiziqlarning hosil bo‘lish mexanizmi C-H tekislikdagi deformatsion

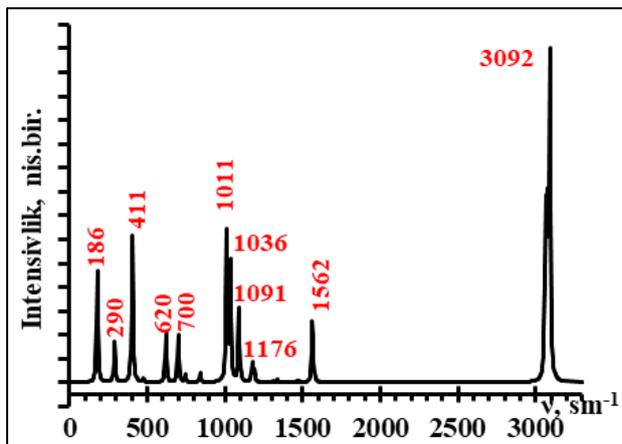
tebranishlari bilan,  $703\text{ cm}^{-1}$  chastotaga to‘g‘ri kelgan spektral chiziq esa tekislikdan tashqari deformatsion tebranishlari bilan bog‘liq bo‘lib, Cl atomining qisman manfiy zaryadlanishi ( $\delta^-$ ) C-H bog‘larining tekislikdagi deformatsion tebranishlarining amplitudasi oshishiga sabab bo‘lgan.

419 va  $199\text{ cm}^{-1}$  chastotali spektral chiziqlar mos ravishda C-Cl bog‘ining tekislikdagi hamda tekislikdan tashqari aylanma-chayqalma harakatlariga tegishli ekanligi qayd etildi. C-Cl bog‘ining tekislikdagi va tekislikdan tashqari aylanma-chayqalma harakatlari bilan bog‘liq spektral chiziqning quyi chastotada hosil bo‘lishiga sabab xlorbenzol molekulasining inersiya momenti qiymatining kattaligidir.

Eksperiment yordamida olingan yorug‘likning KS spektrini tahlil qilishda, xususan, ba’zi quyi chastotalar sohasida qo‘shimcha hosil bo‘lgan spektral chiziqlarni molekulaning aylanma-chayqalma harakatlariga bog‘lashni, nazariy tahlilsiz to‘g‘ri deb bo‘lmaydi, chunki quyi chastotalar oralig‘ining o‘zida ham turli intensivliklarga ega bo‘lgan spektrlar mavjud. 5-rasmda o‘rganilayotgan molekulaga tegishli nazariy hisoblangan KS spektri tasvirlangan. 419 va  $199\text{ cm}^{-1}$  chastotali spektral chiziqlar mos ravishda nazariy hisoblangan 411 hamda  $186\text{ cm}^{-1}$  chastota qiymatli spektral chiziqlarga to‘g‘ri kelib, 8 va  $13\text{ cm}^{-1}$  ga farq qilgan. Kvant-kimyoviy usul yordamida nazariy hisoblangan spektrlarni umumiy soni eksperimentdan olingan spektrlar soni bilan bir hil natijaga ega bo‘ldi. Faqat ayrim tebranishlar bilan bog‘liq chastotalarda kichik siljishlar kuzatildi. Bu esa kvant-kimyoviy hisoblashlardagi ayrim kamchiliklar bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin.



**4-rasm.** Xlorbenzol uchun eksperimental olingan IQ yutilish spektri.

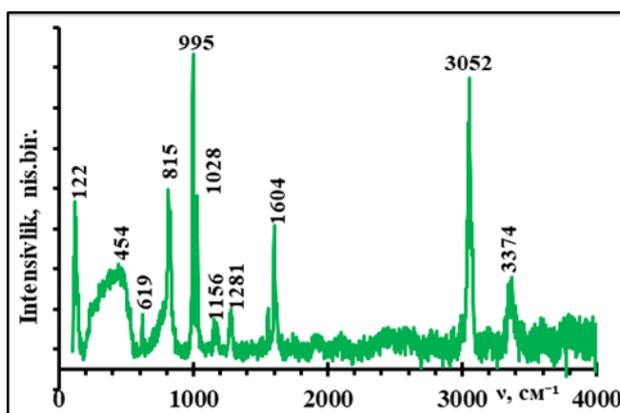


**5-rasm.** Xlorbenzol uchun nazariy hisoblangan KS spektri.

Molekulasining strukturasi xuddi shunday o‘rin almashgan boshqa turdagi galoid atomi bo‘lgan brombenzol va orto-dibrombenzol suyuqliklarida ham eksperimental hamda nazariy tadqiqotlar o‘tkazildi. Olingan natijalar tahlili yuqoridagi xulosalarimizni tasdiqladi.

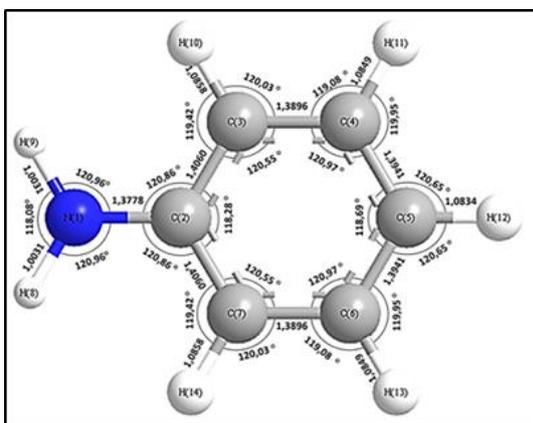
Tadqiqotlar, molekulasi strukturasi vodorod o‘rniga kiritilgan  $\text{NH}_2$  funksional guruhi bo‘lgan anilin suyuqligida davom ettirildi. 6-rasmda anilinning to‘lqin uzunligi  $532\text{ nm}$  bo‘lgan lazerdan foydalanib  $0-4000\text{ cm}^{-1}$  chastota oralig‘ida eksperimental olingan KS spektri keltirilgan. Anilinning C-H atomlarining simmetrik valent tebranishlari bilan bog‘liq spektral polosaning maksimumi KS spektridagi  $3052\text{ cm}^{-1}$

chastotaga to'g'ri keladi. Benzolning KS spektri bilan solishtirilganda bu chiziq  $-10 \text{ cm}^{-1}$  quyi chastotalar tomon siljiganligi kuzatildi.

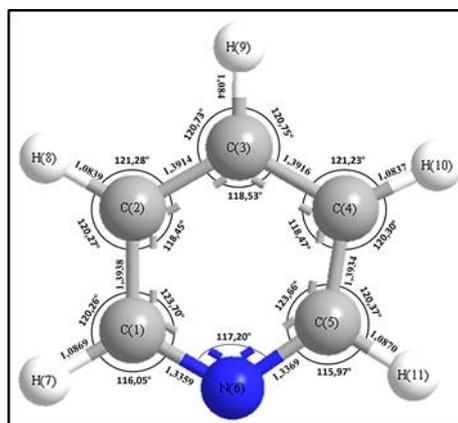


**6-rasm.** Anilin molekulasini uchun eksperimental olingan KS spektri.

Molekulaning  $\text{NH}_2$  guruhiga yaqin C-H (7-rasmga qarang) bog'larining uzunligi nazariy hisoblashlar bo'yicha  $0,0858 \text{ \AA}$  qiymatga teng bo'lib, benzolning C-H bog'larining uzunligiga nisbatan  $0,0013 \text{ \AA}$  ( $0,12 \%$ ) qiymatga uzaygan. Bu holat, albatta, KS spektrida valent tebranish chastotalarining o'zgarishini yuzaga keltiradi. Bizning fikrimizcha, molekuladagi atomlar bog'lanish uzunliklarining o'zgarishiga  $\text{NH}_2$  guruhining aromatik halqa bilan konjugatsiya ta'sirlashuvi sabab bo'lgan. Ya'ni azot atomi aromatik benzol halqasiga juft elektronlari bilan zaryad uzatishi, atomlar orasidagi bog'lanish uzunligini oshishiga olib kelgan.



**7-rasm.** Anilin molekulasini strukturasi modelini.

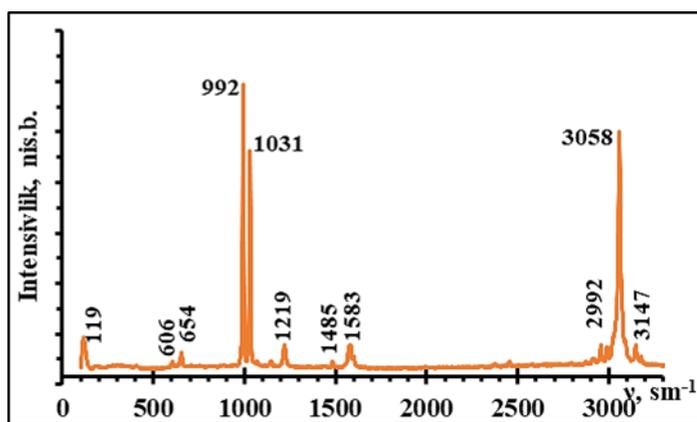


**8-rasm.** Piridin molekulasini strukturasi modelini.

Keyingi tadqiqotlarimiz molekula strukturasi piridin halqasidan tashkil topgan piridin va 3-metilpiridin suyuqliqlarida olib borildi. Piridin molekulasini benzol halqasiga vodorod bilan bog'langan uglerod atomlari o'rniga azot atomi kiritilishi natijasidir (8-rasmga qarang). Piridin 9-rasmda tasvirlangan eksperimental olingan KS spektrini tahliliga ko'ra benzolning KS spektriga nisbatan ko'p o'zgarish bo'lmagan.

Piridin KS spektridagi  $3058 \text{ cm}^{-1}$  chastota qiymatli intensivligi yuqori spektral chiziq C-H bog'i simmetrik valent tebranishlari bilan bog'liq bo'lib, benzolga nisbatan  $-4 \text{ cm}^{-1}$  ga quyi chastota tomon surilganligi aniqlandi. Bu spektrlarning siljishi bilan bog'liq qonuniyatlar to'g'risida ilmiy xulosaga kelishimiz uchun kvant-kimyoviy

nazariy hisoblashlar o‘tkazildi. Nazariy hisoblashlar ORCA dasturida, Xartri-Fok metodi HF/6-311G\*\* bazislar to‘plami asosida amalga oshirildi.



**9-rasm.** Piridin molekulasini uchun eksperimental olingan KS spektri.

Piridin molekulasining atomlari uchun nazariy hisoblangan Milliken zaryadlar taqsimoti natijasi 2-jadvalda keltirilgan. Jadval tahliliga ko‘ra, barcha vodorod atomlari va 2 ta uglerod atomi ( $C_1$  va  $C_5$ ) qisman musbat, azot atomi (eng ko‘p) va qolgan uglerod atomlari esa qisman manfiy zaryadlangan. Azot atomiga yaqin turgan  $H_7$  va  $H_{11}$  vodorod atomlarining zaryadlari biroz kattaroq.  $C_1-H_7$  va  $C_5-H_{11}$  bog‘ uzunligi qiymatlari mos ravishda 1,0869 hamda 1,0870 Å ga teng bo‘lib, benzol C-H bog‘ uzunliklariga solishtirilganda 0,0025 Å uzaygan qolgan C-H bog‘lari uzunligi nisbatan biroz kamaygan. C-H bog‘i valent tebranishlari bilan bog‘liq spektral chiziqning quyi chastota tomon siljishi vodorod bog‘lanishlar sababli ham bo‘lishi mumkin.

**2-jadval.**

Piridin molekulasini atomlari uchun nazariy hisoblangan zaryadlar taqsimoti.

atom	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$	$N_6$	$H_7$	$H_8$	$H_9$	$H_{10}$	$H_{11}$
zaryad	+0,060662	-0,190709	-0,004651	-0,177516	+0,049960	-0,286242	+0,112980	+0,108847	+0,106140	+0,101486	+0,119042

Quyi chastotalarda esa molekulaning lazer nurlanishi ta‘sirida hosil bo‘ladigan piridin halqasidagi azot atomining tekislikdagi aylanma-chayqalma harakati bilan bog‘liq bo‘lgan 650  $sm^{-1}$  chastotada va piridin halqasining tekislikdagi hamda tekislikdan tashqari deformatsion tebranishlari bilan bog‘liq bo‘lgan ikkita 600 va 119  $sm^{-1}$  chastota qiymatli spektrlar kuzatildi. Nazariy hisoblashlar bo‘yicha piridinning azot atomini tekislikdagi aylanma-chayqalma harakati bilan bog‘liq bo‘lgan spektral chizig‘i 660  $sm^{-1}$  chastotaga to‘g‘ri kelib, 10  $sm^{-1}$  qiymatga farq qildi. Tarkibiga yengil atom (azot) va guruhlar (metil va amin) kirgan molekularning aylanma-chayqalma harakatlaridan hosil bo‘lgan spektrlari nisbatan yuqori chastotalar oralig‘iga, tarkibida og‘ir atom (galoid) bo‘lgan molekularning aylanma-chayqalma harakatlaridan hosil bo‘lgan spektrlari esa quyi chastotalar oralig‘iga to‘g‘ri kelishi aniqlandi.

## XULOSALAR

Eksperiment natijalari va nazariy hisoblashlarning tahlili quyidagi ilmiy xulosalarning shakllanishiga asos bo'ldi:

1. Molekulaning erkinlik darajalari bo'yicha aylanma harakatidan hosil bo'ladigan MS spektrini natijalovchi spektrga ulushlarini aniqlash usuli ishlab chiqilib, qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha asimmetrik bo'lgan piridin, anilin va brombenzol molekularini MS spektrlarini tajribada kuzatilgan natijalovchi spektrga qo'shgan ulushlari qiymatlari hisoblandi, uning asosida relaksatsion jarayonlarning asosiy fizik parametrlari aniqlandi va molekulaning tormozlanib harakatlanish nazariyasi asosida tushuntirildi.

2. Ilk bor tajribada kuzatilgan MS spektrining anizotrop tashkil etuvchisiga molekulaning aylanma hamda vibratsion harakatlaridan hosil bo'ladigan MS spektrlarining ulushlarini aniqlovchi metodikasi ishlab chiqildi. Uning asosida molekulaning aylanma va vibratsion harakatlarining ulushlarini qiymatlari aniqlanib, tajriba natijalariga ko'ra, bu harakatlarning muhit temperaturasiga bog'liq ekanligi qayd etildi. Jumladan, temperaturaning oshishi bilan molekulaning tebranishi hisobiga namoyon bo'ladigan yuqori chastotalar oralig'iga to'g'ri keluvchi MS spektrining qonuniyatlari tubdan o'zgarishi kuzatildi. Bu esa molekulaning energetik sathlardagi qonuniyatlari asosida tushuntirildi.

3. Ilk bor xlorbenzol, brombenzol va o-dibrombenzol molekularining KS spektridagi C-H valent tebranishlari bilan bog'liq spektral chizig'i yuqori chastota tomonga siljishi benzol halqasida o'rin almashgan galoid guruhiga tegishli atomlarning rezonans ta'sirlashuvi tufayli yuzaga kelishi aniqlandi.

4. Xlorbenzol va brombenzol molekulari uchun KS spektrining C-H valent tebranishlari bilan bog'liq spektral chizig'ini chastotasi o'zgarishi o'rin almashgan galoid guruhidagi atomlarning massalariga bog'liqligi aniqlanib, bu bog'liqlik monoalmashtirishlar uchun o'rinli ekanligi qayd etildi.

5. Ilk bor anilin molekulasi benzol halqasida o'rin almashgan amin  $\text{NH}_2$  guruhining konjugatsiya ta'sirlashuvi sababli KS spektridagi C-H valent tebranishlari bilan bog'liq spektral chizig'i quyi chastotalar tomon siljishi aniqlandi.

6. Benzol hosilalari molekulasi strukturasiidagi C-H bog'larining tekislikdagi deformatsion tebranishlari amplitudasi o'rin almashgan atomlar elektromanfiyligiga sezgirligi kuzatildi.

7. Ilk bor molekulaning tarkibidagi yengil atomlarning aylanma-chayqalma harakatlaridan hosil bo'lgan KS spektrlari nisbatan yuqori chastotalar oralig'iga, og'ir atom, ya'ni galoid guruhiga kiruvchi atomlarning aylanma-chayqalma harakatlaridan hosil bo'lgan spektrlari esa quyi chastotalar oralig'iga to'g'ri kelishi aniqlanib, ushbu qonuniyatlar molekularining erkinlik darajalari bo'yicha inersiya momentlari orqali tushuntirildi. Tadqiqot tarkibiga kiruvchi molekularning aylanma-chayqalma harakatlari natijasida kuchli intensivlikka ega bo'lgan KS spektrlarini namoyon bo'lishi tajribada aniqlanib, alohida atomlarning tebranishidan hosil bo'ladigan majburiy kombinatsion sochilish effektini ham tadqiq qilish imkoniyatlarini ochib beradi.

8. Kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida tadqiqot obyektlari strukturasi xarakterlovchi molekulaning modeli yaratilib, atomlar orasidagi bog‘lanish uzunliklari, bog‘lanishlar orasidagi burchaklar hisoblanib, maqsadli moddalar sintez qilish mumkin ekanligi bo‘yicha tavsiyalar berildi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ САМАРКАНДСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ  
УНИВЕРСИТЕТЕ ИМЕНИ ШАРОФА РАШИДОВА**

---

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА**

**ХУДОЙБЕРДИЕВА ДИЛАФРУЗ БОЙКУЛОВНА**

**СПЕКТРОСКОПИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО  
ДВИЖЕНИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ  
АТОМОВ И МОЛЕКУЛ ЖИДКОЙ СРЕДЫ С МЕТИЛ И  
ГАЛОИДОЗАМЕЩЁННЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ**

**01.04.05 - Оптика**

**АВТОРЕФЕРАТ**

**диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам**

**Самарканд – 2025**

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан под номером B2022.2.PhD/FM723.

Диссертация выполнена в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улеглоба. Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.samdu.uz) и на информационно-образовательном портале «Ziyonet» (www.ziyonet.uz).

**Научный руководитель:** Отажонов Шавкат  
доктор физико-математических наук, профессор

**Официальные оппоненты:** Азаматов Закиржан Тахирович  
доктор физико-математических наук, профессор

Муродов Гуломхон  
кандидат физико-математических наук, доцент

**Ведущая организация:** Ташкентский государственный технический университет имени Ислама Каримова

Защита диссертации состоится «27» 02 2025 г. в 11<sup>30</sup> часов на заседании Научного совета PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 при Самаркандском государственном университете имени Шарофа Рашидова. (Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz, Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, Институт инженерной физики, 1-этаж, 114-аудитория).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова (зарегистрирован под № 11). (Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40.

Автореферат диссертации разослан «15» 02 2025 года.  
(протокол рассылки № 11 от «15» 02 2025 года.)



**М.Х.Ашуров**

Председатель научного совета  
по присуждению ученых степеней,  
д.ф.-м.н., академик

**Р.М.Ражабов**

Ученый секретарь научного совета  
по присуждению ученых степеней,  
к.ф.-м.н., доцент

**Д.И.Семенов**

Председатель научного семинара при научном  
совете по присуждению ученых степеней,  
д.ф.-м.н., доцент

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** Во многих странах мира особое внимание уделяется исследованию межмолекулярного взаимодействия, а также влияния его природы и силы на оптические спектры, проявляющиеся в конденсированных средах со сложной молекулярной структурой. Одной из причин является то, что закономерности межмолекулярного взаимодействия влияют на различные фотофизические процессы: помимо передачи энергии межмолекулярного взаимодействия, они играют роль и в формировании физико-химических свойств конденсированных сред. Кроме того, знание законов, регулирующих внутри- и межмолекулярные процессы взаимодействия, даёт возможность заранее прогнозировать синтез химических веществ, направленных на достижение определённых целей.

На сегодняшний день, опираясь на имеющиеся в мировой науке теоретические и фундаментальные результаты, следует отметить, что изучение жидкого состояния веществ, а именно кинетики физических и химических процессов, протекающих в жидкой фазе за крайне короткие промежутки времени и имеющих важное научное и прикладное значение, по-прежнему остаётся нерешённой задачей. Существуют различные, иногда противоречивые мнения относительно закономерностей внутри- и межмолекулярных взаимодействий в многоатомных органических жидкостях со сложным строением и того, как они проявляются в оптических спектрах. Решение этой научной проблемы и создание молекулярной теории, полноценно отражающей свойства жидких сред, требуют дальнейших спектроскопических исследований. Также спектры комбинационного рассеяния света, проявляющиеся в результате колебательно-вращательного движения молекул под воздействием лазерного излучения, имеют практическое значение в низкочастотной области, но научные исследования в этой области ограничены и они в последние годы практически не изучались.

В нашей Республике в последние годы уделяется большое внимание развитию научно-исследовательских работ, связанных, в частности, с изучением изменений структуры органических жидкостей, состоящих из различных бензольных и пиридиновых производных молекул, широко применяемых в фармакологии, агрохимии и промышленности, и отображением этих изменений в оптических спектрах. Исследование структуры молекулы и спектральных особенностей, возникающих при её структурных изменениях, что имеет важнейшее значение для понимания межмолекулярного взаимодействия и его природы, остаётся одной из актуальных задач. Эти задачи находят своё отражение в ряде указов и постановлений Президента Республики Узбекистан, направленных на достижение конкретных целей.

В частности, Постановление № ПП-5032 от 19 марта 2021 года «О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики», Указ № УП-5847 от 8 октября 2019 года «Об утверждении концепции развития системы высшего образования Республики Узбекистан до 2030 года», Постановление № ПП-4358 от 17 июня 2019 года «О мерах по

коренному совершенствованию системы подготовки востребованных квалифицированных кадров и развитию научного потенциала в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека в 2019-2023 годах», а также другие нормативно-правовые документы, и настоящее диссертационное исследование в определённой степени служит выполнению задач, установленных в этих документах.

**Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологии в Республике.** Данная исследовательская работа выполнена в рамках приоритетного направления II: «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение» развития науки и технологии Республики.

**Степень изученности проблемы.** Учёными из зарубежных стран, стран Содружества Независимых Государств и Узбекистана были проведены научные исследования кинетики релаксационных процессов и оптических свойств в конденсированных средах. В частности, за рубежом такие учёные, как З. Гу, В. Чен, Л. Ду, Х. Ши и Ф. Ван (Китай), Г. Шакила, С. Перианди и С. Рамалингам (Индия), Кирилл Журавлев, Катрина Траиков, Жаохуи Донг и Янг Сонг (США), А. Онал, М. Окур (Турция), а также учёные из стран СНГ: А.В. Сечкарев, Н.Г. Бахшиев, В.С. Горелик, Н.Г. Торгунаков, В.С. Старунов, И.Л. Фабелинский (Россия), Л.А. Булавин, И.Ю. Дорошенко, В.Е. Погорелов (Украина), Б.Н. Нарзиев, А.А. Адхамов, В.М. Коровина (Таджикистан), У.Н. Ташкенбаев, Л.М. Собиров, А. Жумабаев, А. Хушвактов, А. Абсанов, Б. Куйлиев, Ш. Отажонов, Б. Эшчанов, М. Алижонов (Узбекистан) провели научные исследования, имеющие фундаментальное и прикладное значение в данной области.

На основе этих исследований были определены некоторые физические величины релаксационных процессов через изучение закономерностей межмолекулярного взаимодействия.

В частности, была исследована температурная зависимость характерной спектральной линии в низкочастотной области на линии  $780\text{ см}^{-1}$  в спектре комбинационного рассеяния (КР) ацетона, растворённого в трансформаторном масле. Для вещества 1-бром-2-хлорбензола, содержащего бензол в структуру которого введены атомы брома и хлора, были зафиксированы спектры КР и инфракрасного (ИК) излучения в диапазоне частот  $100\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ , а сопоставление с колебательными частотами, рассчитанными теоретически методом HF/DFT (B3LYP), показало сильное влияние замещений галогенов на некоторые колебательные частоты бензола. Структурные переходы жидкости пиридина и их свойства при давлении до 26 ГПа были изучены с помощью спектров КР и ИК поглощения, выявив изменения интенсивности контуров спектров и зависимость числа колебательных спектров от давления в различных диапазонах. Четыре стабильные изомеры молекулы 4-фенилбутиламина были экспериментально исследованы через ИК ( $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ ) и КР ( $60\text{--}3700\text{ см}^{-1}$ ) спектры, а также теоретически изучены методом B3LYP/6-311++G(d,p) приближения, что позволило при помощи экспериментальных и теоретических данных получить наиболее стабильную форму молекулы 4-фенилбутиламина. В результате применения неэмпирических расчётов показано, что водородные

связи типа O – H...O, N – H...O, O – H...N являются основными причинами формирования молекулярных комплексов. Определено соотношение оптических спектров, образующихся при вращательном движении по степеням свободы молекулы, к результирующим спектрам и сопоставлено с существующей теорией.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего учебного заведения, где выполнена диссертация.** Диссертационное исследование выполнено в рамках фундаментального проекта FZ-20200929385 «Разработка спектроскопических и неэмпирических методов анализа и применения наноразмерных молекулярных кластеров биологических объектов» (2022-2027 гг.), проводимого в сотрудничестве с Национальным университетом Узбекистана имени Мирзо Улугбека, Самаркандским государственным университетом и Киевским национальным университетом в рамках государственных научно-технических программ, а также в рамках открытых планов научно-исследовательских работ Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека по «Исследованию релаксационных процессов в конденсированных средах с использованием спектроскопических методов».

**Цель исследования.** Цель данной работы заключается в исследовании спектроскопическими методами закономерностей колебательного и вращательного движения под воздействием лазерного излучения атомов и молекул жидких сред с метил и галоидозамещёнными элементами.

**Задачи исследования:**

изучить оптические спектры, связанные с вращательным движением молекул по степеням свободы, и на основе полученных результатов определить физические параметры, характеризующие закономерности релаксационных процессов;

определить долю оптических спектров, возникающих в результате вращательного движения молекул по степеням свободы, от результирующих спектров;

исследовать закономерности взаимной корреляции (тесного порядка) молекул жидкости;

определить влияния на оптические спектры функциональных групп различной природы, внедрённых в бензольное и пиридиновое кольцо (структуру);

исследовать закономерности проявления оптических спектров в области низких частот;

определить длины связей атомов в молекулах, углы между связями и частоты собственных колебаний с помощью квантово-химических теоретических расчетов.

**Объект исследования.** В качестве объекта исследования были выбраны 6 молекул органических веществ бензола и пиридина, структуры которых замещены такими функциональными группами, как метил, амин и галоген.

**Предметом исследований** является изучение свойств многоатомных молекул под воздействием лазерного излучения, закономерностей колебательно-вращательного движения молекул, процессов межмолекулярного взаимодействия, влияния температуры окружающей среды на оптические спектры.

**Методы исследования.** В исследовательской работе использованы методы молекулярного рассеяния света, комбинационного рассеяния, инфракрасной абсорбционной спектроскопии и квантово-химического моделирования.

**Научная новизна диссертационного исследования** следующая:

разработан метод определения вклада молекулярного рассеяния света, возникающего вследствие вращательного движения молекулы по её степеням свободы под воздействием лазерного излучения, в результирующий спектр. На этой основе установлены основные физические параметры релаксационных процессов и даны их объяснения в рамках теории заторможенного движения молекулы.

впервые обнаружено, что спектральная линия КС, связанная с валентными колебаниями связи С-Н в молекулах хлорбензола, бромбензола и одибромбензола, сдвигается в область более высоких частот благодаря резонансному влиянию атомов галогенной группы, замещающих бензольное кольцо.

впервые установлено, что спектральная линия КС, соответствующая валентным колебаниям связи С-Н в молекуле анилина, сдвигается в область более низких частот вследствие конъюгационного влияния аминогруппы  $\text{NH}_2$ , замещающей бензольное кольцо.

впервые выявлено, что амплитуда плоскостных деформационных колебаний связей С-Н в структуре бензольных производных чувствительна к электроотрицательности замещающих атомов.

впервые экспериментально показано, что из-за вращательно-качательного движения групп атомов в молекулах со сложным строением в области низких частот проявляются линии КС с высокой интенсивностью. Это имеет не только фундаментальное, но и прикладное значение, поскольку, во-первых, открывает возможность изучать вынужденный эффект комбинационного рассеяния, вызванный колебаниями отдельных атомов, а во-вторых, позволяет определять термодинамические величины и даже рассчитывать молярную массу макромолекул.

установлено, что частоты спектров, возникающих при вращательно-качательном движении лёгких атомов в молекулах с метильной группой, существенно отличаются от частот движения более тяжёлых атомов в молекулах с галогенными группами. Показано, что это объясняется различиями в значениях момента инерции молекул.

**Практические результаты исследования** следующие:

Разработаны механизмы проявления молекулярного спектра рассеяния света за счет флуктуации анизотропии, а также разработан метод определения доли спектров, генерируемых вращательным движением молекулы, в

результатирующем спектре и молекулярных параметров релаксационных процессов. Этот метод может быть использован в спектроскопических исследованиях;

Результаты анализа изменений спектра КР, связанных с природой измененных в структуре молекулы атомов и групп, могут быть использованы при идентификации ингредиентов в спектральном анализе;

На основании появления спектров, связанных с вращательным качанием молекулы в нижнем диапазоне частот, установлена возможность наблюдения спектра вынужденного комбинационного рассеяния и разработаны методы расчета ряда термодинамических величин.

**Достоверность результатов исследования.** Использование в исследованиях рамановских спектрометров InVia и FT-IR Spectrum Two, являющиеся современными экспериментальными приборами, обсуждение и публикация результатов исследования в материалах республиканских и международных научно-практических конференциях, статьи опубликованные в журналах, включенные в список ВАК и других зарубежных научных изданий (Scopus), а также одобренность выводов и рекомендаций компетентными организациями указывает на достоверность результатов исследования.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Научная значимость результатов исследований объясняется изучением величины корреляции близких друг к другу атомов в многоатомных молекулах, проявлением законов межмолекулярного взаимодействия в оптических спектрах, реалистичной визуализацией структурного состояния молекулы на основе изучения кинетики процессов релаксации и создания молекулярной теории на основе этих научных результатов.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что научные результаты изучения влияния света на молекулярные и комбинационные спектры рассеяния при включении атомов метила и галоида в структуру молекулы, состоящей из бензольного кольца с существующими закономерностями, служат для синтеза и разработки химических веществ, направленные на определенную цель.

Результаты квантово-химических расчетов на основе комбинационных спектров рассеяния света для объектов исследования предлагают методы определения энергии взаимодействия атомов, длин связей и углов между атомами, что дает возможность создать молекулярную теорию.

**Внедрение результатов исследования.** На основании научных результатов, основанных на изучении закономерностей межмолекулярного взаимодействия в органических веществах, входящих в состав метильных и галогенных групп, выбраны в качестве объекта исследования внедрены следующим образом:

результаты анализа молекулярного и комбинационного рассеяния и инфракрасных спектров света используются при проведении научно-исследовательских работ в Чирчикском государственном педагогическом университете.

В частности, метод расчета величины энергии, связанной с колебательно-вращательными движениями молекул, возникающими в нижнем частотном диапазоне под воздействием лазерного излучения с помощью спектра комбинационного рассеяния света использовался в международном научном проекте номер REP-04032022-206 под названием «Появление оптических гармоник в оптоэлектронных сетях и управление процессами распространения солитонов» (2022-2024 гг.) использовался при анализе законов образования второй и выше гармоник и определении термодинамических параметров среды, в которой распространяются солитоны. (Справка № 01/260 от 5 февраля 2024 г. Чирчикского государственного педагогического университета);

Методы неэмпирического определения энергии активации молекул на энергетических уровнях и моделирования пространственной структуры молекул на основе квантово-химических расчетов по теме FZ-20200929385 «Разработка методов спектроскопического и неэмпирического анализа для изучения и применение наноразмерных молекулярных кластеров биологических объектов» (2022-2027 гг.) в фундаментальном проекте государственной научно-технической программы были использованы для определения механизмов образования и термодинамической устойчивости молекулярных комплексов. (Справка Самаркандского государственного университета имени Ш. Рашидова от 15 мая 2024 года № 10-2255);

Теоретические и экспериментальные результаты, представленные в большом объеме, интегрированы в рабочей учебной программе специального курса, так как «Взаимодействие лазерного излучения с окружающей средой» для студентов магистратуры по направлению Физики (по направлениям) на кафедре Фотоники факультета Физики Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека и используется на лекциях и семинарах. В их числе теория торможения движения молекул по степеням свободы, закономерности, связанные с вращательно-качательным движением молекул, которые до сих пор не изучены, послужили обогащению учебных занятий результатами, полученными в современных оптических устройствах. (Справка Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека №04/11-4441 от 21 мая 2024 г.)

**Апробация результатов исследования.** Результаты исследования диссертации обсуждались на 3 международных и 6 республиканских научных конференциях.

**Публикация результатов исследования.** Всего по теме исследования опубликовано 16 научных работ, в том числе 7 статей в научных изданиях, рекомендованных к публикации основных научных результатов диссертации доктора философии (PhD) ВАК Республики Узбекистан (5 в республиканских, 1 в базе данных Scopus и 1 в международных журналах).

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы. Объем диссертации составил 139 страниц, включая 46 рисунка и 19 таблиц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, её необходимость, связь исследования с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики, степень изученности проблемы, связь с научно-исследовательскими планами высшего учебного заведения, цель и задачи исследования, методы, выбранные объекты и предмет исследования, научная новизна, практическая значимость результатов, их надёжность и внедрение на практике, апробация работы в республике и за рубежом, публикации по теме исследования, а также структура и объём диссертации.

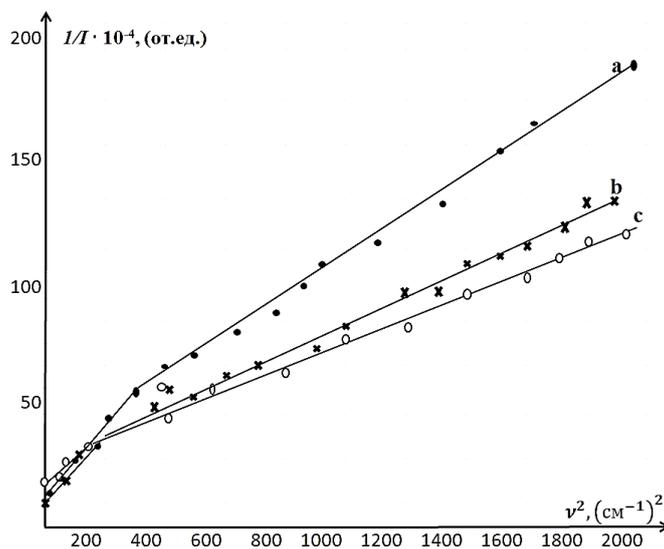
Первая глава диссертации под названием **“Роль спектроскопических исследований в изучении законов межмолекулярных взаимодействий в жидких фазах, образуемых многоатомными молекулами под воздействием излучения электромагнитных волн. Решения и проблемы.”** дан обзор литературы по результатам теоретических и практических исследований спектров молекулярного рассеяния (МР) и КР света в жидкостях. Рассмотрены тонкая структура спектра МР света (законы Мандельштама-Бриллюэна) и влияние межмолекулярных взаимодействий на спектры. Проанализированы механизмы проявления спектра молекулярного рассеяния света, связанного с изотропной и анизотропной составляющими флуктуаций, а также представленная в литературе информация по изучению структуры вещества с помощью спектров молекулярного рассеяния. Приведена информация по анализу работ, посвященных изучению изменений молекулярной структуры и влияния внутренних и межмолекулярных взаимодействий на спектры КР, и такая информация играет важную роль в определении целей и задач диссертационной работы, ее реализации. и анализ полученных результатов.

Во второй главе диссертации под названием **“Экспериментальные методы исследования строения органических веществ, в структуру которых введены атомы метила и галогена”** представлены сведения об объектах исследования и их основных физико-химических свойствах, а также методика приготовления чистых проб. В качестве объектов исследования были выбраны молекулы бензольного и пиридинового колец с различным характерным галогеновым и метильным замещением. Описаны методы экспериментальной регистрации МР, КР и ИК спектров поглощения света и методика проведения эксперимента. Даны сведения о принципе работы и основных параметрах прибора-спектрометра с дифракционной решеткой ДФС-12, спектрометров In Via Raman и Spectrum Two FT-IR использованных в исследованиях. Представлены сведения о методе Хартри-Фока, использованном при теоретическом расчете геометрических параметров молекул и частот собственных колебаний атомов в молекуле изучаемых органических веществ.

В третьей главе диссертации посвященной **“Появлению в спектре МР света обусловленного флуктуациями анизотропии законов межмолекулярного взаимодействия в конденсированных средах, которые асимметричны по тензору полярности”** приведены методики определения физических

параметров, связанных с вращением молекул по степеням свободы под воздействием излучения электромагнитных волн, результаты исследований по определению закономерностей формирования спектра МР, полученного экспериментально для жидкостей, молекулы которых асимметричны по тензору поляризуемости.

Спектр МР, формирующийся за счет флуктуации анизотропии среды, имеет фундаментальное и практическое значение при анализе структуры среды, при изучении законов релаксационных процессов. С использованием МР спектра молекулы с целью изучения законов ее вращательного движения были проанализированы экспериментально полученные МР спектры для таких жидкостей, как пиридин, бромбензол и анилин, молекула которых асимметрична по тензору возбуждения, при различных температурах и в диапазоне частот 0-60 см<sup>-1</sup>. В качестве примера на рис. 1 представлена частотная зависимость распределения спектральной интенсивности при трех различных температурах для молекулы пиридина.



**Рис. 1.** Частотная зависимость распределения спектральной интенсивности при различных температурах для молекулы пиридина: а) 20 °С, б) 50 °С, в) 80 °С.

Согласно теории торможения движения молекул по степеням свободы, если молекулы, составляющие среду, несимметричны по тензорам поляризуемости, спектр МР будет состоять из 3-х компонент, т.е. график зависимости  $1/I \sim (\nu^2)$  будет состоять из трех частей. Значения тензора поляризуемости молекулы пиридина, соответствующие степеням свободы молекулы, отличаются друг от друга и принимают следующие значения:  $a_{\zeta} = 118,8 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$ ,  $a_{\eta} = 57,8 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$ ,  $a_{\xi} = 108,4 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$ . Исходя из этого, спектр, образуемый вращательным движением молекулы пиридина вокруг каждой оси в определенном диапазоне частот, должен состоять из 3-х компонент в графике зависимости  $1/I \sim (\nu^2)$ . Однако по результатам экспериментов было установлено, что частота в диапазоне 0-60 см<sup>-1</sup> состоит из 2-х компонент, то есть 2-х контуров Лоренца с “узкой” и “широкой” спектральной шириной ( $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  соответственно). Начиная с 60 см<sup>-1</sup> интенсивность спектра МР резко снижается на более высоких частотах.

Это несоответствие можно объяснить с помощью теории заторможенного движения молекул в терминах степеней свободы.

На основе теории тормозного движения молекул показана сложность структуры контура спектра МР, а движение молекул считается состоящим из трех слабо связанных между собой тормозных вращательных движений. Степень торможения вращательного движения вокруг степеней свободы молекул различна. Потому что форма и анизотропия внутренней площади молекул вокруг каждой оси инерции различны. Это приводит к тому, что вращательное движение молекулы относительно каждой оси создает определенное значение интенсивности спектра МР.

По результатам эксперимента по анализу вращательного движения молекулы пиридина вокруг молекулярных осей  $\zeta$ ,  $\eta$ , и  $\xi$  установлено образование контура 1 (т.е. контура с узкой шириной  $\sigma_1$ ), соответствующего в диапазоне частот 0-17  $\text{см}^{-1}$  на рис. 1-а) является результатом действия молекулы пиридина. Это связано с торможением движения вокруг оси  $\eta$ . Причина узкой спектральной ширины 1-го контура состоит в том, что поскольку  $\sigma_1 \sim 1/\tau_1$  (время  $\tau$ -релаксации), время релаксации, необходимое для оборота молекулы пиридина вокруг оси  $\eta$ , было большим, поскольку она не движется свободно вокруг этой оси, а скорее тормозится. Формирование контура в диапазоне частот 17-60  $\text{см}^{-1}$  является результатом вращательного движения молекулы вокруг оси  $\zeta$ , а поскольку движение молекулы вокруг этой оси свободно относительно оси,  $\tau$  принимает малое значение, что означает, что спектральная ширина 2-го контура равна  $\sigma_2 \sim 1/\tau_2$ , поэтому значение  $\sigma_2$  становится большим. На основе теории торможения молекул можно сделать вывод о спектре, образуемом вращением молекулы вокруг оси  $\xi$ , и о соотношении этого спектра с результирующим спектром согласно теоретически рассчитанному значению  $\alpha_\xi$ .

На основании теории тормозного движения молекул доля спектра, образуемого вращательным движением молекулы пиридина в каждой степени свободы, в результирующем спектре определяется следующим уравнением:

$$\alpha_i = \frac{(a_k - a_j)^2}{2g^2} \quad (1)$$

$$g^2 = \frac{1}{2} \left[ (a_\zeta - a_\eta)^2 + (a_\eta - a_\xi)^2 + (a_\xi - a_\zeta)^2 \right] \quad (2)$$

В этой формуле  $g^2$ - степень анизотропии молекул,  $a$ - коэффициенты поляризуемости,  $i$  принимают значения  $i = \zeta, \eta, \xi$ . Распределение молекулы пиридина по осям можно выразить уравнением (1) следующим образом:

$$\alpha_\zeta = \frac{(a_\zeta - a_\eta)^2}{2g^2}, \quad \alpha_\eta = \frac{(a_\eta - a_\xi)^2}{2g^2}, \quad \alpha_\xi = \frac{(a_\eta - a_\xi)^2}{2g^2} \quad (3)$$

На основе уравнений (3), зная значения тензоров поляризуемости  $a_\zeta$ ,  $a_\eta$  и  $a_\xi$  и уровень анизотропии  $g^2$ , можно теоретически рассчитать доли спектров МР, образующихся при вращении молекулы пиридина вокруг каждого оси спектра, наблюдаемого в результате эксперимента. Согласно теоретическим расчетам он равен значениям:  $\alpha_\zeta = 0,58$ ,  $\alpha_\eta = 0,4$ ,  $\alpha_\xi \approx 0,02$  или  $\alpha_\zeta + \alpha_\eta + \alpha_\xi = 1$ .

Из этих значений доли спектра видно, что доля спектра рассеяния, образуемого вращением молекул вокруг оси  $a_z$  молекулы пиридина, в результирующий спектр равна 0,02, что составляет всего 2 % всего спектра не удалось измерить. Следовательно, граф на рисунке 1 состоял из суммы двух лоренцевых контуров. Анализ спектров показывает, что при изменении температуры среды время релаксации  $\tau_1$ , характеризующее вращательное движение молекулы пиридина вокруг оси  $\eta$ , уменьшается с ростом температуры, т.е. наблюдалось снижение от  $\tau_1 = 2,5 \cdot 10^{-12}$ с до  $1,1 \cdot 10^{-12}$ с. Объяснить эту закономерность можно на основе теории торможения движения молекул. В частности, при повышении температуры окружающей среды вращательное движение молекулы вокруг оси  $\eta$  ускоряется, в результате чего время  $\tau_1$ , необходимое молекуле для совершения одного полного оборота вокруг оси  $\eta$ , уменьшается. В результате было замечено, что ширина  $\sigma_1$  спектра, образуемого вращением молекулы вокруг этой оси, увеличивается, то есть наблюдается повышение от  $\sigma_1 = 2,1 \text{ см}^{-1}$  до  $4,8 \text{ см}^{-1}$ .

В результате броуновского движения анизотропных молекул среды помимо флуктуаций плотности возникают и флуктуации расположения анизотропных молекул, т. е. анизотропные флуктуации. Это означает, что в результате статистического характера движения молекул в объемах, малых по сравнению с длиной волны света, число молекул, расположенных в одном направлении, больше, чем в любом другом направлении. При формировании флуктуаций анизотропии необходимо учитывать вклад колебательного движения молекулы (колебания очень малой амплитуды). В частности, флуктуации, возникающие под воздействием колебательных движений молекулы, должны способствовать формированию анизотропной составляющей спектра МР. Вклад колебательных движений анизотропных молекул можно рассчитать, зная значения процента спектральных контуров, рассчитанные теоретически и найденные на основе экспериментов при определенной температуре:

$$\text{равно } \alpha_{\text{вращ.}} = \frac{1}{1+\gamma}, \quad \alpha_{\text{кол.}} = \frac{\gamma}{1+\gamma} \quad \text{и} \quad \gamma = \frac{1}{\alpha_2^{\text{теор.}}} \left( \frac{\alpha_1^{\text{теор.}}}{\alpha_1^{\text{эксп.}}} - 1 \right) \quad (4)$$

Величины вкладов  $\alpha_{\text{вращ.}}$  и  $\alpha_{\text{кол.}}$  для пиридина были рассчитаны при различных температурах и получены следующие результаты: в диапазоне  $20 \div 150 \text{ }^\circ\text{C}$  вклад  $\alpha_{\text{вращ.}}$  вращательного движения уменьшилось с 0,91 до 0,52. А вклад колебательного движения  $\alpha_{\text{кол.}}$  увеличился с 0,09 до 0,47. Согласно этим результатам и экспериментальным результатам, полученным при критической температуре для бензола в научной литературе, можно предположить, что среда с анизотропными свойствами начинает проявлять изотропные свойства с повышением температуры.

Четвертая глава диссертации посвящена «**Механизмам КР и ИК спектрам поглощения света в органических углеводородах, содержащих метил и галогеновые соединения**», а также влиянию функциональных групп различной природы в структуре производных бензола и пиридина на КР спектрах молекулы проанализирован с помощью ИК-спектров поглощения и представлены

результаты исследований с использованием расчетов квантово-химической теории.

Экспериментальные и теоретические исследования проводились в хлорбензольной жидкости с целью определения доли в спектре КР галоидного атома хлора, внедренного в бензольное кольцо вместо одного атома водорода, изменений в спектре и появления дополнительных спектров. Модель строения молекулы хлорбензола представлена на рисунке 2.

На рис. 3 изображен экспериментально полученный КР спектр хлорбензола и бензола, взятого за эталон. Согласно анализу результатов исследований, в экспериментальном спектре КС на частоте  $3070\text{ см}^{-1}$  наблюдалась спектральная линия, связанная с симметричными валентными колебаниями С-Н молекулы хлорбензола. По сравнению со спектром КР бензола он оказался сдвинут в сторону более высоких частот на величину  $+8\text{ см}^{-1}$ . Такой

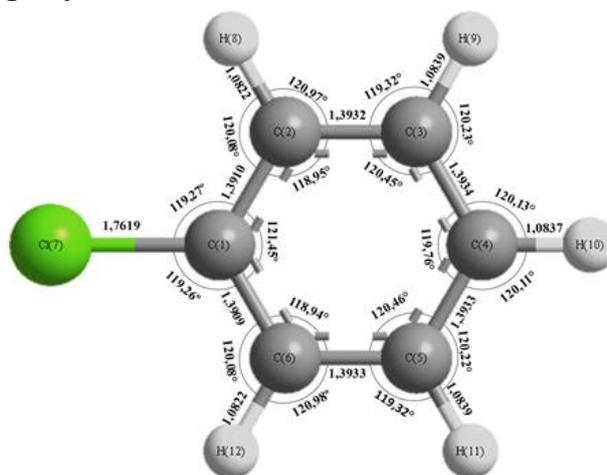


Рис. 2. Модель строения молекулы хлорбензола.

сдвиг спектральной линии является результатом увеличения силовой постоянной между атомами. Из анализа таблицы 1 видно, что длина связи С-Н хлорбензола несколько меньше длины связи С-Н бензола.

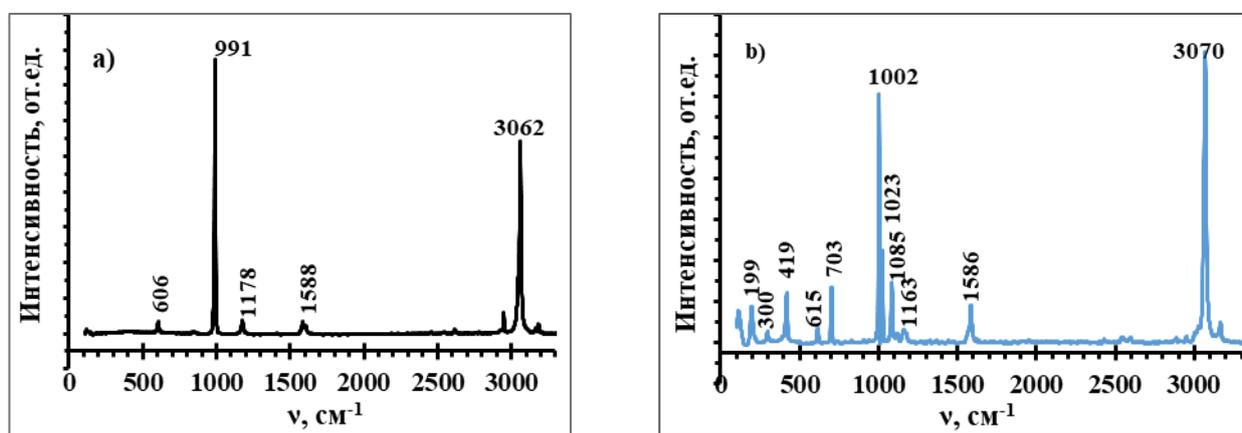


Рис. 3. Экспериментально полученные спектры КР: а) бензол, б) хлорбензол

Например, величина уменьшения длины между связями  $C_2-H_8$  и  $C_6-H_{12}$ , соседними со связями  $C-Cl$ , составляет  $0,0025\text{ Å}$  ( $0,23\%$ ). По нашему мнению, изменение силовых констант внутри молекулы вызвано резонансным действием атома хлора, внедренного в ароматическое кольцо.

Спектральная линия, связанная с валентными колебаниями  $C-Cl$ , должна появиться в области более низких частот, поскольку длина связи  $C-Cl$  на  $0,6797\text{ Å}$  ( $68\%$ ) больше длины связи  $C-H$ , что приводит к уменьшению силовой константы. Поскольку хлор является атомом с высокой

электроотрицательностью, связь С-Сl поляризована, и это изменение дипольного момента приводит к наблюдению спектральной линии с высокой интенсивностью в ИК спектре поглощения.

Для проверки правильности нашего вывода были продолжены дальнейшие эксперименты и получены ИК спектры поглощения молекулы хлорбензола. На рис. 4 изображен ИК спектр поглощения хлорбензола. Из рисунка видно, что спектральная линия с наибольшей интенсивностью соответствует значению частоты  $736 \text{ см}^{-1}$ , и установлено, что генерация этого спектра связана с валентными колебаниями С-Сl. Причина того, что в спектре КР не наблюдается спектральная линия, соответствующая валентным колебаниям С-Сl, означает, что величина поляризуемости молекулы не изменился.

**Таблица 1.**

Теоретически рассчитанные длины связей ( $r$ , Å) между атомами молекул бензола и хлорбензола и результаты их сравнения

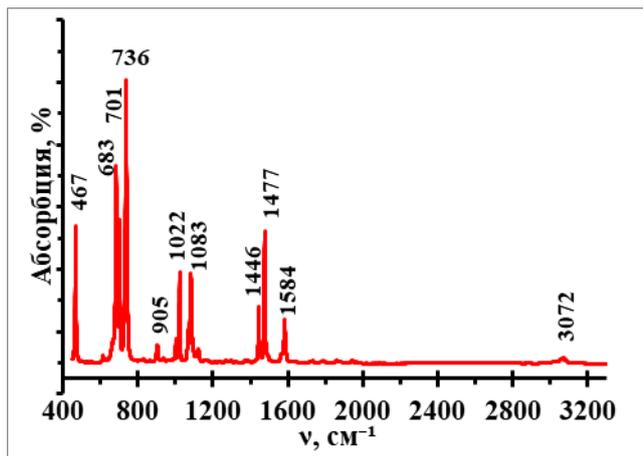
Молекула	C1-C2	C2-C3	C3-C4	C4-C5	C5-C6	C6-C1	C6-H7, C1-H12	C2-H8	C3-H9	C4-H10	C5-H11	C6-H12
Бензол - C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	1,3939	1,3939	1,3938	1,3939	1,3939	1,3938	1,0845	1,0847	1,0845	1,0845	1,0847	1,0845
Хлорбензол - C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	1,3910	1,3932	1,3934	1,3933	1,3933	1,3909	1,7619	1,0822	1,0839	1,0837	1,0839	1,0822
Δ, %	-0,2	-0,04	-0,03	-0,04	-0,04	+0,007	+68	-0,23	-0,05	-0,07	-0,07	-0,21

Механизм формирования дополнительных спектральных линий со значениями частот  $1085$  и  $1023 \text{ см}^{-1}$  в спектре КР связан с плоскостными деформационными колебаниями С-Н, а спектральная линия, соответствующая частоте  $703 \text{ см}^{-1}$ , связана с деформационными колебаниями вне плоскости, частично отрицательный заряд атома Сl ( $\delta^-$ ) вызывал увеличение амплитуды плоских деформационных колебаний связей С-Н.

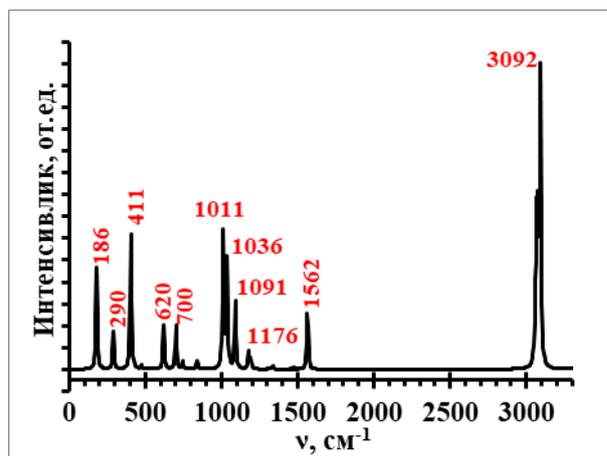
Отмечено, что спектральные линии с частотой  $419$  и  $199 \text{ см}^{-1}$  принадлежат плоскостному и внеплоскостному вращательному движению связи С-Сl соответственно. Причиной формирования спектральной линии на более низкой частоте, связанной с плоскостными и внеплоскостными вращательными движениями связи С-Сl, является большая величина момента инерции молекулы хлорбензола.

При анализе полученного с помощью эксперимента спектра КР света, в частности, без теоретического анализа нельзя считать корректной связь дополнительных спектральных линий, образующихся в некотором более низкочастотном диапазоне, с вращательным качанием молекулы, потому что в самом нижнем диапазоне частот существуют спектры с разной интенсивностью.

На рис. 5 представлен теоретически рассчитанный КР спектр исследуемой молекулы. Спектральные линии с частотами 419 и 199  $\text{см}^{-1}$  соответствовали теоретически рассчитанным спектральным линиям со значениями частот 411 и 186  $\text{см}^{-1}$  и отличались на 8 и 13  $\text{см}^{-1}$ . Общее количество теоретически рассчитанных спектров квантово-химическим методом имело тот же результат, что и количество спектров, полученных в результате эксперимента. Наблюдались лишь небольшие сдвиги частот, связанные с некоторыми колебаниями. Это может быть связано с некоторыми недостатками квантово-химических расчетов.



**Рис. 4.** Экспериментальный ИК-спектр поглощения хлорбензола

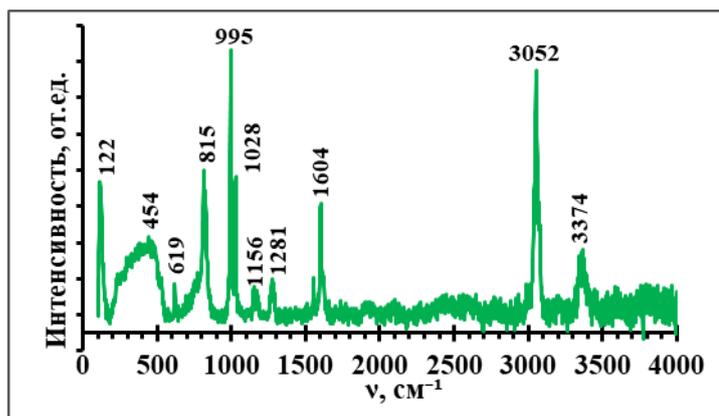


**Рис. 5.** Теоретически рассчитанный спектр КР хлорбензола

Экспериментальные и теоретические исследования проводились также на бромбензольных и орто-дибромбензольных жидкостях, имеющих одинаковое положение в молекулярной структуре атома галогена. Анализ полученных результатов подтвердил наши выводы, сделанные выше.

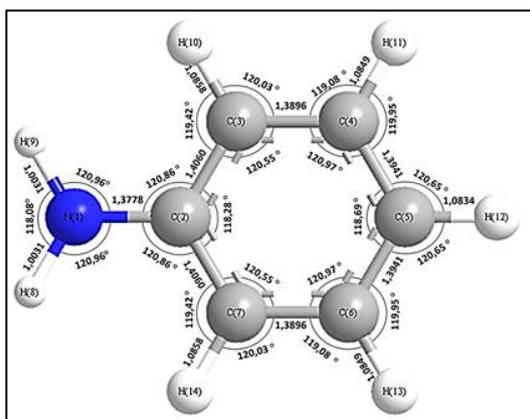
Исследования были продолжены на жидком анилине, в структуру молекулы которого вместо водорода введена функциональная группа  $\text{NH}_2$ . На рис. 6 показан КР спектр анилина, полученный экспериментально в диапазоне частот 0-4000  $\text{см}^{-1}$  с использованием лазера с длиной волны 532 нм. Максимум спектральной полосы, связанной с симметричными валентными колебаниями атомов С-Н анилина, соответствует частоте 3052  $\text{см}^{-1}$  в спектре КР. При сравнении со спектром КР бензола было замечено, что эта линия сдвинута в сторону частот ниже -10  $\text{см}^{-1}$ .

Длина связей С-Н, близких к группе  $\text{NH}_2$  молекулы (см. Рис. 7), согласно теоретическим расчетам равна 0,0858 Å, что на 0,0013 Å (0,12%) больше длины связей С-Н бензола. Такая ситуация обязательно вызывает изменение частот валентных колебаний в спектре КР. По нашему мнению, изменение длин связей атомов в молекуле вызвано сопряжением группы  $\text{NH}_2$  с ароматическим кольцом. То есть перенос заряда атома азота на ароматическое бензольное кольцо с его парой электронов привел к увеличению длины связи между атомами.

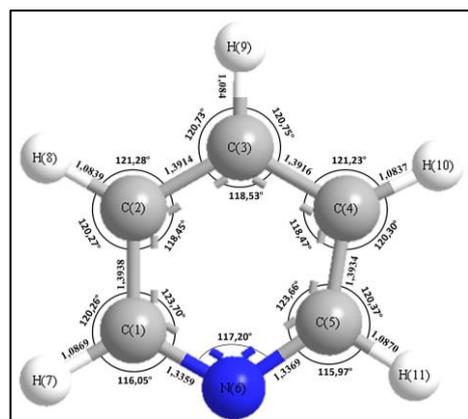


**Рис. 6.** Экспериментально полученный КР спектр молекулы анилина.

Дальнейшие наши исследования проводились в пиридиновых и 3-метилпиридиновых жидкостях, молекулярная структура которых состоит из пиридинового кольца. Молекула пиридина образовалась в результате введения в бензольное кольцо атома азота вместо атома углерода с водородной связью (см. Рис. 8). Согласно анализу экспериментально полученного КР спектра пиридина, изображенного на рис. 9, не произошло больших изменений по сравнению с КР спектром бензола.



**Рис. 7.** Модель строения молекулы анилина.



**Рис. 8.** Модель строения молекулы пиридина.

Установлено, что интенсивность высокой спектральной линии со значением частоты  $3058 \text{ см}^{-1}$  в КР спектре пиридина связана с симметричными валентными колебаниями связи С-Н, и она сдвинута в более низкую частоту на  $-4 \text{ см}^{-1}$  по сравнению с бензолом. Чтобы прийти к научному выводу о закономерностях, связанных со сдвигом этих спектров, были проведены квантово-химические теоретические расчеты. Теоретические расчеты проводились в программе ORCA на основе базиса метода Хартри-Фока HF/6-311G<sup>\*\*</sup>. Результат теоретически рассчитанного распределения зарядов по Милликену для атомов молекулы пиридина представлен в табл. 2.

Согласно анализу таблицы, все атомы водорода и 2 атома углерода (C<sub>1</sub> и C<sub>5</sub>) частично заряжены положительно, а атом азота и остальные атомы углерода частично отрицательно заряжены. Заряды атомов водорода Н<sub>7</sub> и Н<sub>11</sub>, близких к атому азота, немного больше. Длины связей C<sub>1</sub>-Н<sub>7</sub> и C<sub>5</sub>-Н<sub>11</sub> составляют 1,0869 и 1,0870 Å соответственно, а остальные длины связей С-Н немного уменьшены на

0,0025 Å по сравнению с длинами связей С–Н бензола. Сдвиг спектральной линии, связанной с валентными колебаниями связи С–Н, в сторону более низких частот может быть обусловлен и водородными связями.

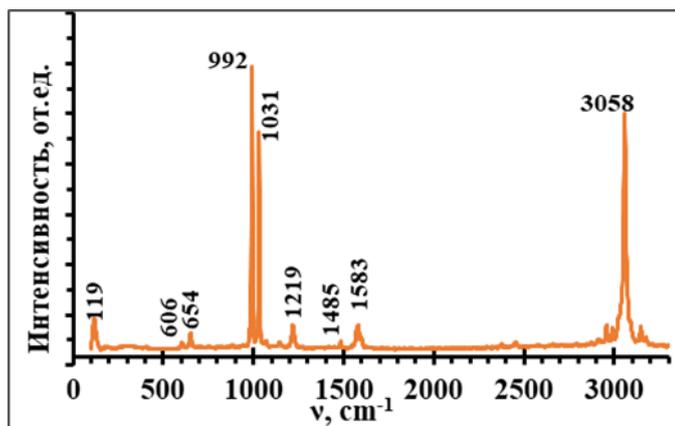


Рис. 9. Экспериментально получен КР спектр молекулы пиридина.

Таблица 2.

Теоретически рассчитано распределение зарядов для атомов молекулы пиридина.

атом	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	N <sub>6</sub>	H <sub>7</sub>	H <sub>8</sub>	H <sub>9</sub>	H <sub>10</sub>	H <sub>11</sub>
заряд	+0,060662	-0,190709	-0,004651	-0,177516	+0,049960	-0,286242	+0,112980	+0,108847	+0,106140	+0,101486	+0,119042

На более низких частотах наблюдался спектр с частотой 650 см<sup>-1</sup> образованный лазерным облучением молекулы и связанная с плоскостным вращательным качанием атома азота в пиридиновом кольце, и два спектра со значениями частот 600 и 119 см<sup>-1</sup> связанных с плоскостными и внеплоскостными деформационными колебаниями кольца. Согласно теоретическим расчетам, спектральная линия пиридина, связанная с вращательным качанием атома азота в плоскости, соответствовала частоте 660 см<sup>-1</sup> и отличалась на 10 см<sup>-1</sup>. Установлено, что относительно высокочастотному диапазону соответствуют спектры, формируемые вращательными качаниями молекул, содержащих легкие атомы (азот) и группы (метил и amino), а спектры, формируемые вращательными качаниями молекул, содержащих тяжелые атомы (галогениды) соответствуют нижнему частотному диапазону.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ экспериментальных результатов и теоретических расчетов является основой для формирования следующих научных выводов:

1. Разработан метод определения доли МР спектра, возникающего вследствие вращательного движения молекулы, от результирующего спектра, а также значения долей МР спектров молекул пиридина, анилина и бромбензола,

являющихся асимметричными по тензору поляризуемости, добавленными к полученному спектру, наблюдавшемуся в эксперименте, на основе которого были определены основные физические параметры релаксационных процессов и объяснены на основе теории торможения движения молекулы;

2. Впервые разработана методика определения доли спектров МР, формируемых вращательными и колебательными движениями молекулы, и анизотропной составляющей спектра МР, наблюдаемой в эксперименте. На его основе были определены значения вращательных и колебательных движений молекулы, а по результатам экспериментов отмечено, что эти движения зависят от температуры среды. В частности, с повышением температуры наблюдалось радикальное изменение законов спектра МР, соответствующее высокочастотному диапазону, проявляющееся за счет вибрации молекулы. Это было объяснено на основе законов энергетических уровней молекулы.

3. Впервые обнаружено, что спектральная линия молекул хлорбензола, бромбензола и о-дибромбензола, связанная с валентными колебаниями С-Н в спектре КР, сдвинута в более высокочастотную сторону вследствие резонансного взаимодействия атомов галогенной группы, замещенной в бензольном кольце.

4. Установлено, что изменение частоты спектральной линии, связанной с валентными колебаниями С-Н КР спектра молекул хлорбензола и бромбензола, зависит от масс атомов в замещенной галоидной группе, и отмечено, что эта зависимость актуальна для монозамещений.

5. Впервые обнаружено, что спектральная линия, связанная с валентными колебаниями С-Н в спектре КР, смещается в область низких частот из-за эффекта сопряжения замещенной аминной группы  $\text{NH}_2$  в бензольном кольце молекулы анилина.

6. Установлено, что амплитуда плоскостных деформационных колебаний связей С-Н в молекулярной структуре производных бензола чувствительна к электроотрицательности замещенных атомов.

7. Впервые установлено, что спектры КР, образованные вращательными качаниями легких атомов в молекуле, соответствуют относительно высокочастотному диапазону, а спектры, образованные вращательными качаниями тяжелых атомов, т.е. атомов, принадлежащих к группе галогенов, соответствуют нижнему диапазону частот, и эти законы представляют собой инерцию степеней свободы молекул, объясняемую через моменты инерций. В эксперименте установлено проявление спектров КР с сильной интенсивностью в результате вращательных качаний включенных в исследование молекул, что открывает возможности исследования эффекта вынужденного комбинационного рассеяния, создаваемого вибрацией отдельных атомов.

8. На основе квантово-химических расчетов создана модель молекулы, характеризующая строение объектов исследования, рассчитаны длины связей между атомами, углы между связями, даны рекомендации по возможности синтеза целевых веществ.

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD OF THE SCIENTIFIC DEGREE OF  
DOCTOR OF PHILOSOPHY PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 SAMARKAND  
STATE UNIVERSITY NAMED AFTER SHAROF RASHIDOV**

---

**NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

**KHUDOYBERDIEVA DILAFRUZ BOYKULOVNA**

**SPECTROSCOPY OF THE VIBRATION-ROTATIONAL MOTION OF  
ATOMS AND MOLECULES OF A LIQUID MEDIUM INCLUDED METHYL  
AND HOLLOW ELEMENTS IN ITS STRUCTURE UNDER THE  
INFLUENCE OF LASER RADIATION**

**01.04.05 – Optics**

**DISSERTATION ABSTRACT  
of the Doctor of Philosophy (PhD) on Physical and Mathematical Sciences**

**Samarkand – 2025**

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered by the Supreme Attestation Commission at the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of the Republic of Uzbekistan under № B2022.2.PhD/FM723

Dissertation has been prepared at the National university of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek.

The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website (www.samdu.uz) and the "Ziyonet" information and educational portal (www.ziyonet.uz).

**Scientific supervisor:** **Otajonov Shavkat**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Official opponents:** **Azamatov Zakirjan Taxirovich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Murodov G'ulomxon**  
CSc in physics and mathematics, docent

**Leading organization:** **Tashkent State Technical University named after Islam Karimov**

Dissertation defense will be held on « 27 » 02 2025 at 11<sup>30</sup> at the meeting of Scientific Council number PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 at Samarkand State University. (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz. cabinet 63, ground floor, the department of Physics, Samarkand State University).

Dissertation is possible to review in Information Resource Centre at Samarkand State University (is registered № 11) (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40).

Abstract of dissertation sent out on « 15 » 02 2025 year

(Registry record № 11 on « 15 » 02 2025 year)



**M.Kh.Ashurov**  
Chairman of scientific council  
on award of scientific degrees,  
DSc in physics and mathematics, academician

**R.M.Radjabov**  
Scientific secretary of scientific council  
on award of scientific degrees,  
CSc in physics and mathematics, docent

**D.I.Semenov**  
Chairman of scientific seminar under scientific  
council on award of scientific degrees,  
DSc in physics and mathematics, docent

## INTRODUCTION ((PhD) dissertation abstract)

**The aim of the research.** The aim of this work is to investigate by spectroscopic methods the regularities of vibrational and rotational motion under the influence of laser radiation of atoms and molecules of liquid media with methyl and galloyl substituted elements.

**The subject of research** 6 molecules of organic substances benzene and pyridine, whose structures are substituted by such functional groups as methyl, amine and halogen, were chosen as the object of study.

**The subject of research** is the study of properties of multi-atomic molecules under the influence of laser radiation, regularities of vibrational and rotational motion of molecules, processes of intermolecular interaction, influence of ambient temperature on optical spectra.

**The scientific novelty of the research** is as follows:

a method has been developed to determine the contribution of molecular light scattering arising from the rotational motion of a molecule through its degrees of freedom under laser irradiation to the resulting spectrum. Based on that, the main physical parameters of relaxation processes have been established and explained within the theory of delayed molecular motion.

for the first time, it has been discovered that the Raman scattering (RS) spectral line associated with C-H valence vibrations in chlorobenzene, bromobenzene, and o-dibromobenzene molecules shifts to higher frequencies due to the resonance influence of halogen atoms substituting the benzene ring.

for the first time, it has been established that the RS spectral line corresponding to C-H valence vibrations in the aniline molecule shifts to lower frequencies due to the conjugation effect of the amino group  $\text{NH}_2$  substituting the benzene ring.

for the first time, it has been revealed that the amplitude of in-plane deformation vibrations of C-H bonds in the structure of benzene derivatives is sensitive to the electronegativity of the substituent atoms.

for the first time, it has been experimentally shown that due to the rotational swinging motion of atomic groups in molecules with complex structures, intense RS lines appear in the low-frequency region. This phenomenon is of both fundamental and applied significance, since, firstly, it provides an opportunity to study the forced Raman scattering effect caused by the vibrations of individual atoms. Secondly, it allows for the determination of thermodynamic parameters and even the calculation of the molar mass of macromolecules.

it has been found that the spectral frequencies resulting from the rotational swinging motion of light atoms in molecules containing a methyl group differ significantly from those of heavier atoms in molecules containing halogen groups. It has been shown that these differences can be explained by variations in the molecular moments of inertia.

**Implementation of the research results.** On the basis of scientific results, based on the study of the regularities of intermolecular interaction in organic substances comprising methyl and halogen groups, chosen as the object of research are implemented as follows:

the results of the analysis of molecular and Raman scattering and infrared spectra of light are used in research work at Chirchik State Pedagogical University.

In particular, the method of calculating the amount of energy associated with the vibrational-rotational motion of molecules arising in the lower frequency range under the influence of laser radiation using Raman spectra was used in the international scientific project number REP-04032022-206 entitled "Appearance of optical harmonics in optoelectronic networks and control of soliton propagation processes" (2022-2024) was used in analyzing the laws of second and higher harmonic generation and determining the thermodynamic parameters of the medium in which the solitons propagate. (Reference No. 01/260 of Chirchik State Pedagogical University of February 5, 2024);

Methods of non-empirical determination of activation energy of molecules at energy levels and modelling of spatial structure of molecules on the basis of quantum-chemical calculations on the theme FZ-20200929385 'Development of methods of spectroscopic and non-empirical analysis for the study and application of nanoscale molecular clusters of biological objects' (2022-2027) in the fundamental project of the state scientific and technical programme were used to determine the mechanisms of formation and thermodynamic stability of molecular complexes. (Reference No. 10-2255 of Samarkand State University named after Sh. Rashidov of May 15, 2024);

Theoretical and experimental results presented in a large volume have been integrated into the working curricula of special course such as "Interaction of laser radiation with environments" for master's degree students in Physics (by direction) at the Photonics Department of the Faculty of Physics of the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek and used in lectures and seminars. Among them, the theory of retarded molecular motion by degrees of freedom, regularities associated with the rotational swing motion of molecules, which have not been studied so far, served to enrich educational classes with the results obtained in modern optical devices. (Reference No. 04/11-4441 of the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek of May 21, 2024).

**Approbation of the research results.** The results of the dissertation research were discussed at 3 international and 6 republican scientific conferences.

**Publication of the research results.** In total, 16 scientific works have been published on the topic of research, including 7 articles in scientific editions recommended for publication of the main scientific results of the dissertation of Doctor of Philosophy (PhD) by the HAC of the Republic of Uzbekistan (5 in republican, 1 in Scopus database and 1 in international journals).

**Structure and scope of the dissertation.** The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion and a list of reference. The volume of the thesis is 139 pages, including 46 figures and 19 tables.

**E'LON QILINGAN ILMİY ISHLAR RO'YXATI**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I bo'lim ( I часть; I part)**

1. Khudoyberdieva D., Otajonov Sh., Eshchanov B., Eshquvatov H., Abdullayev N. Mechanisms of Raman scattering spectrum of light from pyridine molecule in the lower frequency range // Results in Optics, 2024. Vol. 16. 100685, ISSN 2666-9501. <https://doi.org/10.1016/j.rio.2024.100685> **(01.00.00; № 3) (Scopus базасида, IF=2.5).**

2. Худойбердиева Д., Отажонов Ш., Эшчанов Б. Конденсирланган мухитларда молекулаларнинг айланма-чайқалма ҳаракатларининг намоён бўлиш қонуниятларини ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектри ёрдамида тадқиқ қилиш // O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasining ma'ruzalari. – Toshkent, 2023. – № 1. – В. 24-28 **(01.00.00. № 7).**

3. Xudoyberdiyeva D., Otajonov Sh., Eshchanov B. Kondensirlangan muhitlarning tuzilishini tadqiq qilishda molekullarning tebranma spektrlaridagi molekullararo ta'sirlashuv qonuniyatlariga tegishli aylanma-chayqalma harakatlarning namoyon bo'lishi // O'zbekiston milliy Universiteti Xabarleri. – T., 2023. [3/1]. Issn 2181-7324. – В. 516-519 **(01.00.00. № 8).**

4. Отажонов Ш., Эшчанов Б., Худойбердиева Д. Учет влияния межмолекулярных взаимодействий на колебательные спектры молекул и проявление вращательных качаний при исследовании строения конденсированных систем // Ilm sarchashmalari. – Urganch, 2022. – № 12. – В. 38-42 **(01.00.00. № 12).**

5. Худойбердиева Д., Отажонов Ш., Эшчанов Б., Қурбанбаев С. Суяқ ароматик углеводородларда молекулаларнинг релаксацион ҳаракат спектрларининг ҳосил бўлиш механизмлари // Academic research in educational sciences. Vol. 2. Issue 5. – Uzbekistan, 2021. – P. 397-409 // <https://doi.org/10.24411/2181-1385-2021-00904> **(01.00.00. № 14).**

6. Otajonov Sh., Eshchanov B., Khudoyberdieva D. Rotational Motion of Molecules and Structural Transitions in Liquid Pyridine // Annals of the Romanian Society for Cell Biology. Vol. 25. Issue 4. – Romania, 2021. – P. 9274-9280 **(01.00.00. № 40).**

7. Eshchanov B., Otajonov Sh., Gayipov J., Xudoyberdiyeva D., Qurbanbayev S. Intermolecular dynamics of condensed state: study of temperature effect on anisotropy relaxation by vibration spectroscopy // Bulletin of National University of Uzbekistan: Mathematics and Natural Sciences. Vol. 3. Issue 3. – Uzbekistan, 2020. – P. 388-411 // <https://doi.org/10.56017/2181-1318.1119> **(01.00.00. № 8).**

**II bo'lim ( II часть; II part)**

8. Khudoyberdieva D., Otajonov Sh. Effect of halide atoms in molecular structure on vibrational-rotational spectra / Symposium on Advanced Research on

“Generation and Processing of Nano-Functional Materials by Laser Processing”. – Yaponiya, 2024. 1-noyabr. – P. 12-13-b.

9. Xudoyberdiyeva D., Otajonov Sh. Piridin molekulasida strukturasi almashtirilgan metil guruhining kombinatsion sochilish spektrlariga ta'sirini tadqiq qilish / “Fizikada fundamental va amaliy tadqiqotlar” mavzusidagi Xalqaro konferensiyasi materiallari. – T.: O'zMU, 2024. 24-25-may. – B. 28-30.

10. Xudoyberdiyeva D., Otajonov Sh. 1,2-Dibrombenzol molekulasida tarkibidagi atomlararo ta'sirlashuv qonuniyatlarini spektroskopik metod bilan tadqiq qilish / “Kondensirlangan muhitlar fizikasining rivojlanish tendensiyalari” mavzusidagi III Xalqaro ilmiy konferensiya materiallari. – Farg'ona, 2023. 30-31-oktyabr. – B. 267-271.

11. Худойбердиева Д., Отажонов Ш. Молекулаларнинг айланма-чайқалма ҳаракати қонуниятларини ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектри асосида тадқиқ қилиш / “Оптика ва лазер физикасининг муаммо ва истиқболлари” мавзусидаги хорижий олимлар иштирокидаги Республика илмий-амалий конференцияси. – Тошкент, 2023. 26 октябрь. – Б. 11-12.

12. Xudoyberdiyeva D. Xlorbenzol molekulasining tebranma va aylanma harakatlari bilan bog'liq optik spektrlarini tadqiq qilish / “Физика фанининг ривожидида истеъдодли ёшларнинг ўрни” мавзусидаги XVI Республика илмий-амалий конференцияси. – Тошкент, 2023. 28-29 апрель. – Б. 92-95.

13. Xudoyberdiyeva D., Otajonov Sh., Eshchanov B. Kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida molekularning elektron tuzilishi va spektroskopik parametrlarini aniqlash / “Sifatli ta'lim – taraqqiyot poydevori” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiya to'plami. – Toshkent, 2023. 20-aprel. – B. 1180-1184.

14. Xudoyberdiyeva D. Brombenzol molekulasining tebranma harakati qonuniyatlarini yorug'likning kombinatsion sochilish spektriga ta'sirini tadqiq qilish / “Физика фанининг ривожидида истеъдодли ёшларнинг ўрни” мавзусидаги XV Республика илмий-амалий конференцияси. – Тошкент, 2022. 22-23 апрель. – Б. 36-38.

15. Отажонов Ш., Ахмедов Ш., Эшчанов Б. Форма различных полос колебательных спектров в жидких ароматических углеводородах / “Физиканинг ривожидида фундаментал-инновацион тадқиқотлар ва унинг истиқболлари” мавзусидаги Республика илмий-амалий конференцияси. – Тошкент: ЎзМУ, 2021. – Б. 35-36.

16. Отажонов Ш., Шодмонов Ж., Эшчанов Б. Динамический расчет интенсивности Релеевского рассеяния / “Физиканинг ривожидида фундаментал-инновацион тадқиқотлар ва унинг истиқболлари” мавзусидаги Республика илмий-амалий конференцияси. – Тошкент: ЎзМУ, 2021. – Б. 33-35.

Avtoreferat “O‘zMU xabarlari” jurnali tahririyatida tahrirdan o‘tkazilib, o‘zbek, rus va ingliz tillaridagi matnlar o‘zaro muvofiqlashtirildi.

Nashriyot litsenziyasi:



1390

Bosishga ruxsat etildi 10.02.2025 yil.  
Buyurtma № 17/28. Adadi 100 nusxa.  
Bichimi 60x84 1/16. Bosma tabogi 2,75.  
“Times New Roman” garniturasida.  
“Zebo prints” MCHJ bosmaxonasida chop etildi.  
Toshkent sh., Yashnobod t. 22-harbiy shaxarcha.