

Fizika fakulteti
Fizika yo'nalishi
Optika va spektraskopiya fizikasi kafedrası

CD₃F+ HCl sistemasida vodorod bog'lanishli
komplekslarni tebranish spektrini o'rganish
Malakaviy bitiruv ishi

Bajaruvchi: Arapov Shuxrat
Ilmiy rahbar: dots. Murodov G'

Samarqand - 2011

Mundarija

Kirish.....	3
I.Bob. Nazariy qism.	
1.1.Molekula hosil bo'lishida ximiyaviy bog'lanish turlari.....	4
1.2.Molekulalararo o'zaro ta'sir turlari Van-der Vaals kuchlari.....	13
1.3.Vodorod bog'lanish va uning moddalarining xossalari.....	20
1.4.Vodorod bog'lanishning tebranish spektrida namoyon bo'lishi.....	23
II. Bob. Amaliy qism.	
2.1.Spektral asboblari va ularning umumiy xarakteristikasi.....	27
III. Bob Ilmiy natijalar va ularning tahlili	
3.1.CD ₃ F molekulasini va uning tebranish spektri.....	26
3.2.HCl molekulasining tebranmo aylanma spektri.....	32
3.3.CD ₃ F va HCl molekulari orasida vodorod bog'lanish hosil bo'lishi va uning tebranish spektrida namoyon bo'lishi.....	34
3.4.Xulosa.....	42
Adabiyotlar.....	43

KIRISH

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan biri bu vodorod bog'lanishdir. Bunda bir molekula tarkibida ximyaviy bog'lanishda qatnashayotgan vodorod atomi, ikkinchi bir molekulaning elektromanfiy guruhi tomon qo'shimcha bog'lanish hosil qiladi.

Bu bog'lanishlarning energiyasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir energiyasi atrofida va undan kuchliroq bo'lib, o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning spektral parametrlariga kuchliroq ta'sir qiladi. Boshqacha aytganda, molekulalarning aylanma harakati ham, atomlarning bir-biriga nisbatan tebranma harakati ham o'zgaradi. Bundan tashqari molekulalarning elektr xossalari-dipol momenti ham o'zgaradi.

Vodorod bog'lanish tarkibida vodorod atomi bo'lgan barcha molekulalarda uchrashi mumkin. Bunday molekulalarda umumiy elektron juft vodoroddan elektromanfiy element tomon siljigan uning musbat zaryadi esa kichik hajmda to'planganligi uchun bunday praton boshqa atom yoki ionning bo'linmagan elektron jufti bilan o'zaro ta'sirlashadi va uni umumlashtiradi. Natijada vodorod orqali ikkinchi archa bog'lanish vujudga keladi. Vodorod bog'lanishning energiyalari keng oraliqni egallaydi va elektron tebranish va aylanish spektrida namoyon bo'lishini o'rganish infraqizil yutilish hamda kombinatsion sochilish spektrlari yordamida olib boriladi. Vodorod bog'lanishni o'rganish uning fizikadagi ahamiyatidan tashqari ximiya va biologiyada ham muhim rol o'ynaydi.

Ushbu malakaviy bitiruv ishining maqsadi molekulalararo o'zaro ta'sirni o'rganishdan iborat bo'lib, ushbu bitiruv ishida CD_3F va HCl molekulalari o'rtasida hosil bo'ladigan kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarni spektral parametrlari o'rganilgan ushbu molekula misolida energiyasi Van-der Vaals energiyasi qatorida bo'lgan molekulalararo vodorod bog'lanishli komplekslarda ham o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning spektral parametrlari o'zgarishi kuzatilgan. Bunday kuchsiz vodorod bog'lanish komplekslarni ham yangi hosil bo'lgan molekulyar sistema deb qarash mumkin

I.Bob Nazariy qism.

1.1. Malekulani hosil bo'lishida ximyaviy bog'lanish turlari.

Atom bu musbat zaryadlangan yadrosi bilan manfiy zaryadlangan elektronlardan tarkib topgan elektroneytrol zarrachalardir.

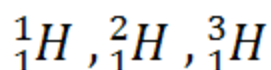
Eng oddiy atom vodorod atomidir. Eng oddiy yadro ham vodorod atomi yadrosidir. Uning zaryadiga tengsiz son jihatdan elektron zaryadiga tengdir, ishorasi teskari bo'ladi. Bu yadroning massasi boshqa barcha atomlar yadro massalaridan eng kichigidir.

$$m=1,679 \cdot 10^{-19} \text{ kg}$$

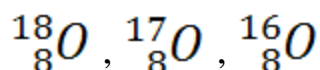
Atomlar bir elementga tegishli bo'lgan ular yadrolarning tarkibi har hil bolishi mumkin. Bu tarqalish asosan yadroda elementar zarrachalar soni har hil bo'lishi sabablari yuzaga kelishi aniqlanib buning oqibatida „izotop“ va „izobara“ tushunchasi yuzaga keladi.

Yadroning zaryadi (pratonlar soni) bir hil bo'lib, og'irliklari har hil bo'lgan bir hil element atomlari izatop deyiladi. Izatoplar deyarli barcha kimyoviy elementlarda mavjuddir.

Masalan: vodorod atomining 3 xil izotoplari mavjud



kislorod atomining izotopi esa

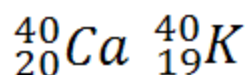


mavjud.

Izotoplar kelib chiqishining sababi atom yadrosida neytronlar sonining har hil bo'lishidir.

Yadro zaryadi turlicha bo'lib, atom og'irliklari bir hil bo'lgan elementlar atomlariga izobarlar deyiladi.

Masalan Kaliy elementining



atomlar o'zaro izobaralar.

Atomlar elektron qavatlaridagi elektronlarning holatini to'liq tavsiflash uchun kvant sonlari (n, l_s, m_s) tushunchalari kiritilgan.

Birinci kvant soni bosh kvant soni bo'lib, u n - harfi bilan belgilangan.

Birinci kvant soni har bir elektron qavatdagi elektronning energiyasini belgilaydi va uning yadrodan qanday masofada joylashganini ko'rsatadi uning qiymatlarini:

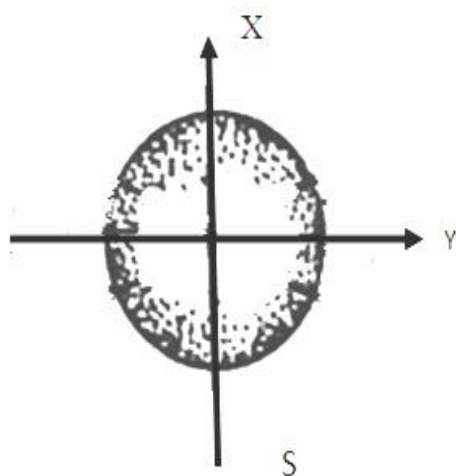
$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

Atom elektron qavatlari tuzilishini o'zgarishi, ularning qavatchalaridan (orbitatallar) dan iborat bo'lishini ko'rsatadi. Bu elektronlar yadro atrofida qanday ko'rinishda harakatlanishini aniqlab beradi, orbital kvant soni l harfi bilan belgilanadi. Orbital kvant sonining qiymati bosh kvant soni qiymatiga bog'liq bo'lib, n ning biror qiymati bosh kvant soni qiymatiga bog'liqdir. n ning biron qiymati uchun

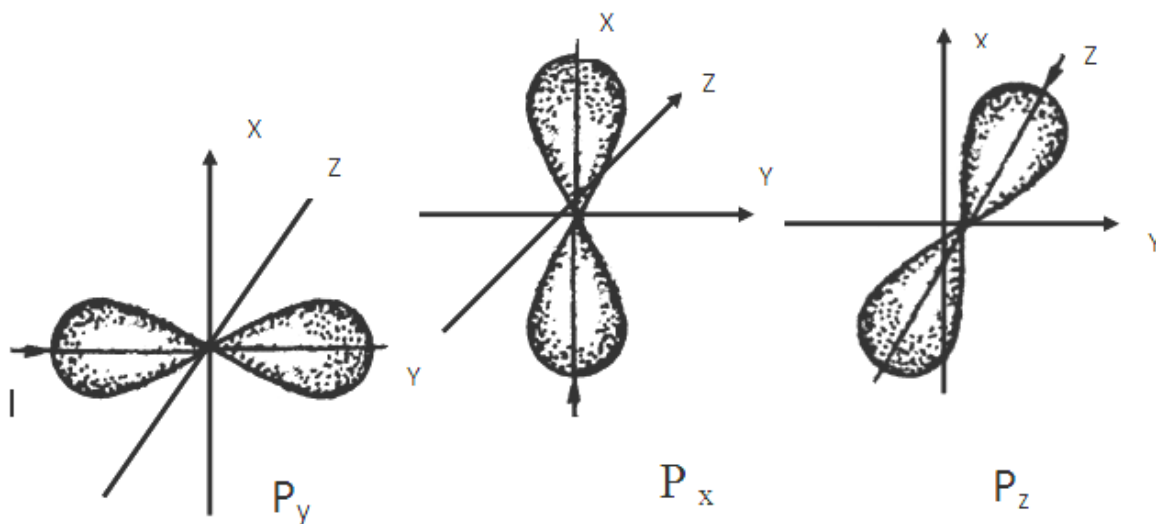
$$l = n - 1 \quad (1,1)$$

bo'ladi.

Elektron orbitalarining fazoviy ko'rinishi sferik, gantelsimon va undan ham murakkab bo'ladi.



1-rasm. S elektron bulutning fazoda joylashish tartibi.



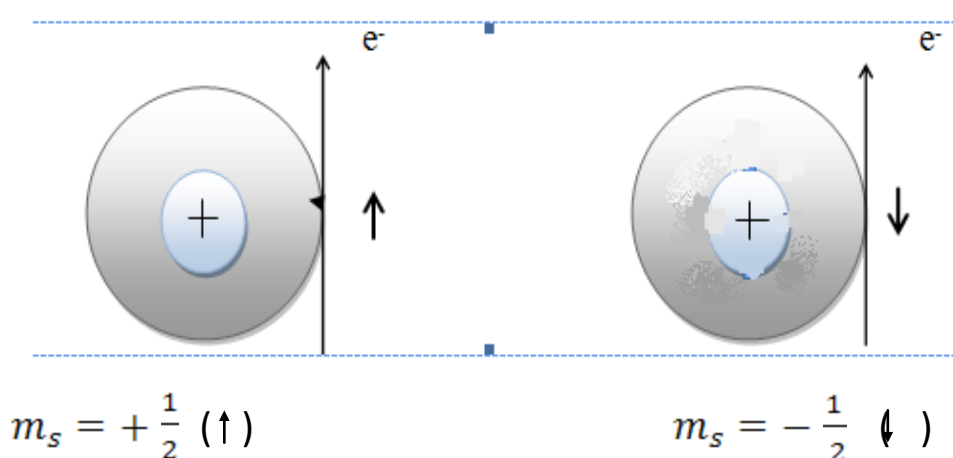
Rasm-2.P elektron bulutining fazoda joylashi. P_x , P_y , P_z .

Magnit kvant soni m_l harfi bilan belgilanadi, magnit kvant soni har elektron qavat va bir orbitalga to'g'ri keluvchi energiya holati energetik yacheykalarni sonini bildiradi.

Magnit kvant soni elektron bulutlari orbitallari fazoda x, y, z o'qlari bo'ylab qanday joylashganini ko'rsatdi.

Elektroni o'z o'qi atrofida qaysi tomonga harakatlanishini ko'rsatuvchi kattalik spin kvant soni deyiladi. m_s harfi bilan belgilanadi. Uning qiymati:

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \cdot \hbar \quad (1,2)$$



(3-rasm) spinlarning o'z o'qi atrofida aylanishi

Elektronlarning xususiy o'qi atrofida aylanishi.

Atomdagi har bir elektron 4 hil kvant soni bilan tavsiflanadi. Kvant sonlari har bir elektronning atomda joylashgan o'zini, tartib energiyasi, harakat shakli, holatini aniq ko'rsatib beradigan asosiy kattalikdir.

Atomning xossalari.

Atomlarning xossalari atom radiyslari, ionlanish energiyasi, elektronga moyillik va elektron manfiylik kiradi.

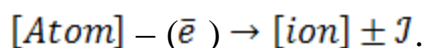
1. Atomlarning radiuslari ($r_{(a)}$) deb atom yadrosi bilan eng tashqi elektron qavat o'rtasidagi masofalarda bir mol atomning egallagan hajmidir.

Atom radiuslari gruppalarida va davrlarda elementning tartib raqamiga bog'liq holda o'zgarib boradi.

a) Davrlarda elementning tartib raqamiga bog'liq holda o'zgarib boradi. SHu bilan birga ularning atom radiusi kichrayib boradi.

b) Gruppalarda elementlarda tartib raqami ortishi bilan elementlarning atom radiuslari ortib boradi.

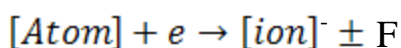
2. Ionlanish energiyasi deb, neytral atomlardan bitta elektrondan ajralib chiqishiga yutiladigan energiyaga aytiladi. U J harfi bilan belgilanadi (J yoki g/mol, eB) atom birliklarida o'lchanadi.



Yoki ionlanish energiyasi bo'sh bog'langan elektronni atomdan urish uchun kerak bo'lgan energiya elektron atomdan uzilganda tegishli kation hosil bo'ladi.

Bitta davrdagi elementlar uchun ionlanish energiyasi yadro zaryadi ortishi bilan chapdan o'ngga tomon ko'payib boradi. Gruppachadan bu energiya elektron yadrodan uzoqlashishi tufayli yuqoridan pastga tomon kamayib boradi.

3. Elektroniga moyillik atomga bitta elektronning birikishidan ajralib chiqadigan energiya yoki yutiladigan energiya elektroniga moyillik deyiladi.



Masalan; Li ning elektroniga moyillik 0,82 eV bo'lsa, F-ftorda 3,88 eV ga tengdir.

Atomlarning yuqoridagi ionlanish energiyasi va elektroniga moyillik xossalari umumlashtiruvchi kattalik elektromanfiylikdir.

4. Elektromanfiylik deb, bir atomning boshqa atom elektron bulutini o'ziga qanchalik tortib olish xususiyatiga aytiladi.

Eng yuqori elektromanfiylikka ega element fluor F atomi bo'lib, u barcha elementlardan elektronlarni tortib oladi va kuchli oksidlovchi xossasini namoyon qiladi. Shu sababli F inert gazlardan Xe bilan tasirlashib, uni oksidlaydi va XeF_2 birikmani hosil qiladi.

Himyaviy bog'lanish asosiy tafsirlari.

Har qanday kimyoviy modda atomlari va ularni birikishidan hosil bo'lgan kristallar, molekular va iondan tashkil topgan materiadir. Bularda atomlar birlari bilan ma'lum turdagi bog'lanishlar yuzaga kelishi mexanizmi, tabiatda ularda ishtirok etuvchi zarrachalar turlariga ko'ra bir necha hil bo'ladi. Himyaviy bog'lanishlarga va ularning hosil bo'lishiga atomlarning elektron tuzilishi nuqtai nazardan qarash lozim, chunki himyaviy elektronlar va elektron bulutlar. bog'lanishlarning hosil bo'lishida ishtirok etuvchi asosiy vosita Kimyoviy bog'lanishni asosiy tavsirlari qatoriga kimyoviy bog'lanish energiyasi, bog'lanish uzunligi, bog'lar orasidagi burchak ya'ni valent burchak va bog'lanish tartibi kiradi.

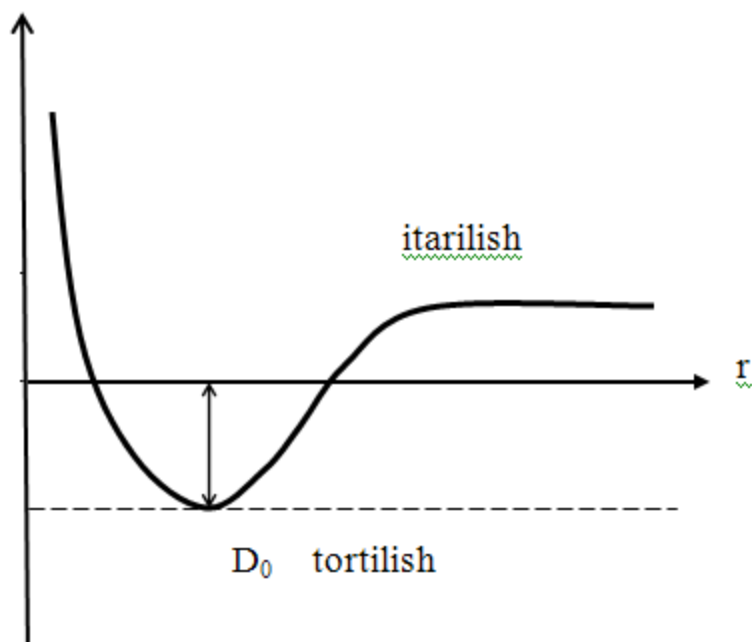
Bog'lanish energiyasi: Kimyoviy bog'ni uzish uchun zarur bo'lgan eng kam energiya miqdoriga bog'lanish energiyasi deyiladi.

Bog'lanish energiyasi qanchalik katta bo'lsa bog' shunchalik barqaror bo'ladi. Bog'lanish energiyasi qanchalik qiymati o'zaro biriktiruvchi atomlarning tabiatiga bog'lanish turi va tartibiga bog'liq bo'ladi.

Masalan; H₂ molekulasidagi H-H bog'lanish energiyasi

$$\Delta E_{H_2} = 463 \text{ kJ/mol} \quad (1,3)$$

Ikki atomli molekularlarda bog'lanish energiyasi shu molekulani atomlarga parchalanish energiyasiga teng.



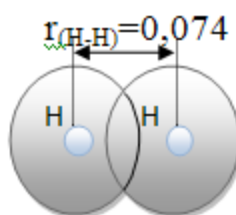
(4-rasm) H₂- molekulasida kimyoviy bog' hosil bo'lishining patensial chuqurligi tortilish

Kimyoviy bog'ning uzunligi:

Kimyoviy bog'ning uzunligi r - harfi bilan belgilanadi.

Kimyoviy bog'ning uzunligi deb, kimyoviy bog'lanish hosil qilishida ishtirok etgan atomlar yadrolar o'rtasidagi masofaga aytiladi.

Masalan; vodorod molekulasining H-H bog'ining uzunligi.(rasm -5)



Rasm-5. vodorod molekulasining H-H bog'ining uzunligi

$$r_{(H-H)} = 0,074 \text{ nm}$$

$$\text{H}_3\text{C} - \text{CH}_3 \text{ da } r_{(C-C)} = 0,154 \text{ nm}$$

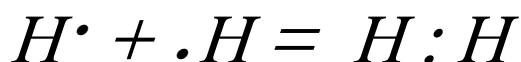
$$\text{HC} \equiv \text{CH} \text{ da } r_{(C-C)} = 0,121 \text{ nm}$$

Valent burchagi. Kimyoviy bog'lanishlar orasidagi burchak valent burchak deyiladi. Agar H₂O molekulasini olib qaralsa H-O bog' bir biriga nisbatan 104,5 burchak ostiga joylashadi va molekula burchak simon tuzilishga ega bo'ladi.

Bog'lanish tartibi o'zaro kimyoviy bog' hosil qilgan atomlar orasida hosil bo'lgan bog'lanishlar soni bo'lib, birlamchi, ikkilamchi, uchlamchi va ba'zi hollarda to'rtlamchi bog'lanish mavjud bo'ladi bog'lanishning tartibi ortishi bilan bog'ning barqarorligi ortadi uning uzunligi qisqaradi.

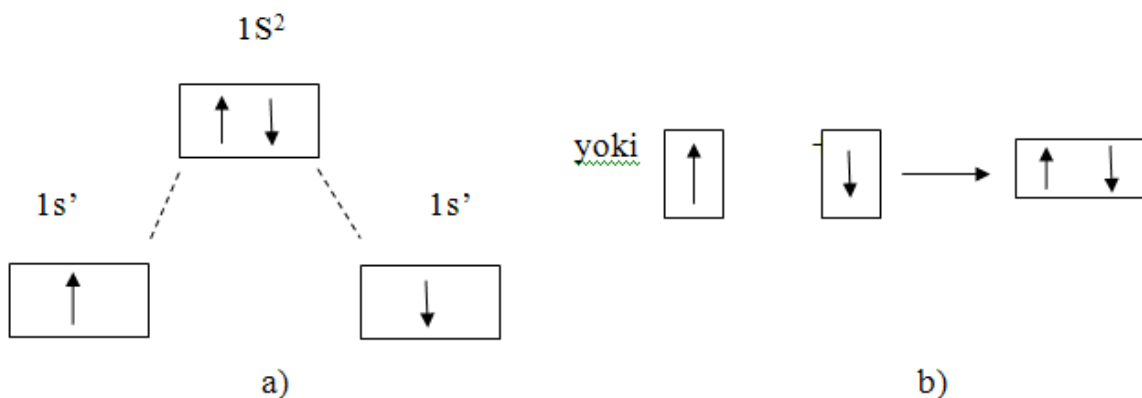
Himyoviy bog'lanish turlicha tasvirlash qabul qilingan.

1) Elementning himyaviy bog'lanish belgisiga quyilgan nuqtalar ko'rinishidagi elektronlar yordamida. Bunda vodorod molekulasining hosil bo'lishi ushbu sxema bilan ko'rsatish mumkin. (rasm-6)



Rasm-6. Vodorod molekulasining hosil bo'lishi.

2) Kvant katakchalar (orbitallar) yordamida bunda qarama-qarshi spinli ikkita elektronning bitta molekulyar kvant katakchalarda joylashuvi sifatida ko'rsatish mumkin.



(7-rasm) Spinni katakchada joylashishi.

Kovalent bog'lanish.

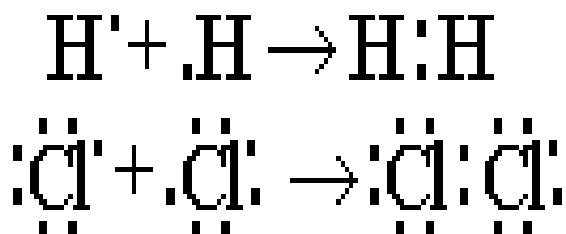
Kovalent bog'lanish – elektron juftlari tufayli vujudga keladigan boglanishdir. Bu ikki elektronli va ikki markaziy bog'lanishdir.

Kovalent bog'lanishni ikki turi mavjuddir.

a) Qutbsiz kovalent bog'lanish elektronmanfiyliklari bir hil yoki o'zaro juda yaqin bo'lgan elementlar atomi o'rtasida yuzaga keladigan bog'lanish qutbsiz kovalent bog'lanish deyiladi.

Masalan; H₂, O₂, Cl₂, F₂ bunda ikki atomli molekularlar misol bo'la oladi ularda elektron juftlari ikkala atonga bir xil darajada taluqlidir .

Masalan:



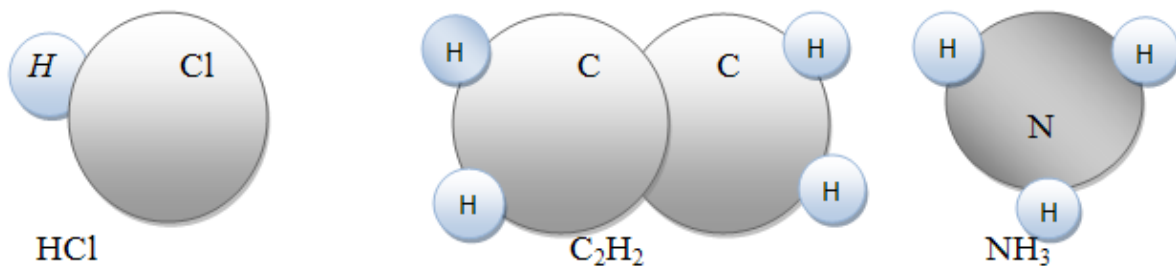
(8-rasm) Elektronlar juftligi ikkala atomga tegishligi.

b) Qutubli kovalent bog'lanish elektromanfiyliklari bir-biridan farq qiluvchi turli elementlar atomlari o'rtasida hosil bo'ladigan kovalent bog'lanish qutubli kovalent bog'lanish deyiladi.

Qutubli malekulalar qatoriga: H₂O, HCl, HF, HBr, larni kiritish mumkin. Qutubli malekulalardan iborat malekulalar gazsimon holatda bo'ladi. Qutubli malekulaning qutublanuvchanlik darajasini tafsiflash uchun dipol momenti tushunchasi kiritilgan.

Qutubli kovalent bog'lanishli malekulalarda musbat va manfiy zaryadlarning assimetrik taqsimlanishi miqdoriy tavsiflovchi vector kattalikka dipol moment deyiladi.

Agar kimyoviy bog'ning dipol moment noldan farqli bo'lsa, bog' qutblangan bo'ladi.



(9-rasm) Qutblangan molekulalar .

1.2 Malekulalararo o'zaro ta'sir turlari. Van-der Vaals kuchlari.

Tabiatda barcha moddalar molekulalardan tashkil topgan va ular orasida tortishish xamda itarishish kuchlari mavjud ularni biz umumiy xolda molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari deb ataymiz.

Biz idiyal gaz qonunlari bilan tanishganimizda bunday gazlarning molekulalari xususiy hajmga ega emas va ular o'zaro ta'sirlashmaydi, deb hisobladik. Bunday o'ta soddalashtirilgan gaz modeli juda siyraklashgan gazlar uchun o'rinli bo'lib, gaz bosimining ortishi bilan ideyal gaz qonunlaridan chetlanishlar ortib boradi.

Masalan; CO_2 gazning bir nechta 10 atmosferadagi izotermosi Boyle-Mariolt qonunlaridan keskin farq qiladi.

Tabiatda mavjud bo'lgan gazlar uchun Mendileev Klapeyron tenglamasi faqat unda yuqori bo'lmagan bosimlardagina bajariladi. Tajriba real gazlarning ideal gazlardan o'z hossalriga ko'ra bir muncha farq qilishini ko'rsatadi va real gazlar qonuniyatlarini o'rganishga molekulalarning o'zlari ma'lum o'lchamga ega ekanliklarini hamda ular orasida o'zaro ta'sir mavjudligini inobatga olish kerak.

Ko'pchilik gaz molekulalarining o'lchamlari 10^{-10} m tartibida bo'ladi ularning hajmlari esa $4 \cdot 10^{-30}$ m³ atrofida normal sharoitda ham bir m³ da

Lashmidt sonicha $n = 2,7 \cdot 10^{25}$ ta havo molekulasi bo'lsa ularni egallagan hususiy hajmi $1,2 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$ ni tashkil etadi. Bu esa havo molekulari egallagan hajm umumiy 1 m^3 hajmning $1 \cdot 10^{-4}$ qismiga yaqin ekanligini ko'rsatadi.

Agar havoning bosimi ortsa, molekula hususiy hajmining ta'siri tufayli Boyl Mariott qonunidan chetlashish sezilarli bo'ladi.

Bundan tashqari real gazlarda idiallikdan chetlanish molekulararo ta'sir tufayli ham ro'y beradi. Molekulararo ta'sir tufayli o'zaro tortishish va itarish kuchlarining natijasidan iborat bo'lib, o'z tabiatiga ko'ra bir necha bo'lishi mumkin bunday ta'sir kuchlariga Van-der Vaals kuchlari ham deyiladi.

Bu kuchlarning tabiati asosan elektrostatik ta'sir kuchlaridan iborat. Eng oddiy bir atomli molekula musbat zaryadlangan yadro va uning atrofida ma'lum orbitalar bo'yicha harakatlanuvchi manfiy zaryadlangan elektronlardan iborat. Vaqtning juda qisqa ulushi davomida bunday musbat va manfiy zaryadlar sistemasini elektr dipol deb qarash mumkin. Dipol o'zi atrofida elektro maydoni hosil qiladi va bu maydon kuchlanganligi noldan farqli, chunki qaralayotgan nuqtadan dipol zaryadlarigacha bo'lgan masofalar har xil ular o'zaro bir-birini kompensatsiyalamaydi.

Agar molekularidagi atom soni ko'p bo'lsa, unda oddiy dipol bo'lmasdan murakkab elektr sistemasini kvadrupol, toifalaridan iborat bo'ladi.

Molekulalar yaqinlashganda o'zaro elektrostatik ta'sir ro'y berradi. Bunday ta'sirga dispersion ta'sir deyiladi.

Ayrim molekularlarda musbat va manfiy zaryadlarning markazlari ustma ust tushmaganligi sababli ular doimiy dipol momentiga ega bo'ladi. Masalan suvning molekulari doimiy dipol momentiga ega. Shunday molekular o'zaro yaqinlashganda dipol-dipol, ya'ni orientatsion ta'sir energiyasi quydagiga teng.

$$U_{or} = \frac{2 \rho_1 \rho_2}{r^3} \quad (2,1)$$

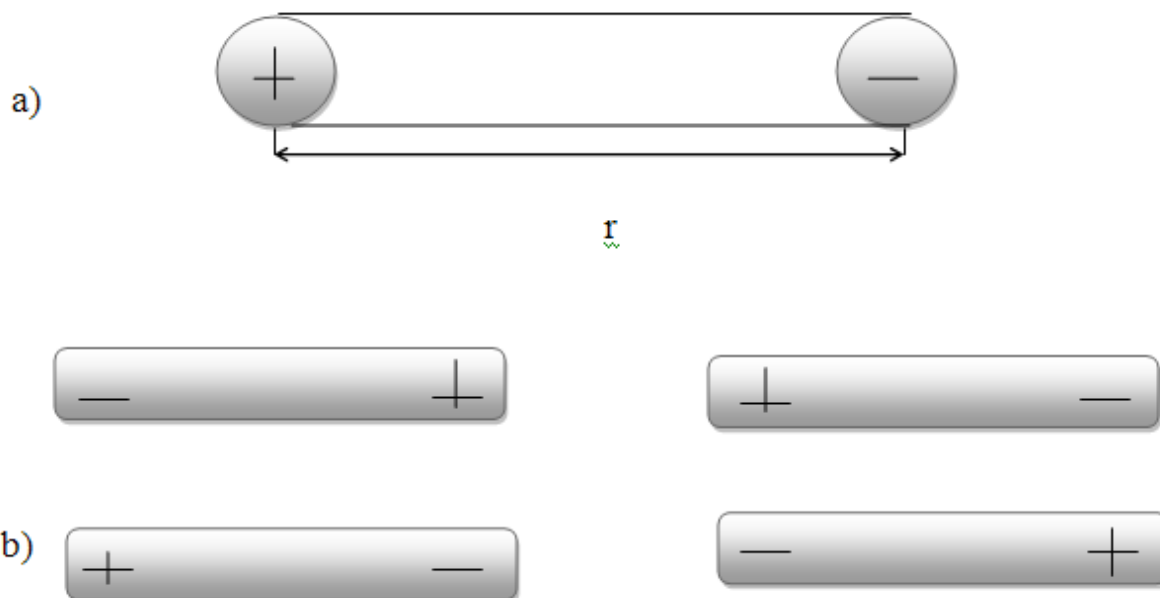
P_1, P_2 – molekullarning dipol moment:

r - ular orasidagi masofa

Bunday ta'sir asosan qutbli molekullar, ya'ni dipol momentiga ega bo'lgan molekullar orasida bo'ladi. Bunda bir molekula tomonidan hosil qilinadigan elektr maydonda ikkinchi molekula orentirlanadi. Molekulaning issiqlik harakati ularning o'zaro orintatsiyasiga qarshilik ko'rsatadi. Demak orientatsion ta'sir hamda molekullarning issiqlik harakatini hisobga olsak, orientatsion ta'sir energiyasi quydagi ko'rinishda buladi.

$$U = \frac{2}{3KT} \cdot \frac{\rho_1 \rho_2}{r^6} \quad (2,2)$$

Ifodadan ko'rinadiki orientatsion ta'sir energiasi temperaturaga bog'liq. Agar temperatura oshsa bu energiyaning qiymati kamayadi.(rasm-1)



(1-rasm).dipol momentiga ega bo'lgan molekullarning tuzilishi.

Dispersion ta'sir. Doimiy dipol momentiga ega bo'lmagan molekular orasida dispersion ta'sir mavjud bo'ladi. Ya'ni qutbsiz molekular o'rtasida buladigan o'zaro ta'sir. Bu holda molekula atomini muvozanat vaziyatdan siljishi natijasida dipol moment vujudga keladi. Bu ta'sirni bo'lishiga molekularni nolinci energiyaga ega bo'lishi sababdir. Bu holda elektronini bir muvozanat holati atrofida tebranib turib, garmonik tebranish hosil qiluvchi zarracha deb qabul qilindi. Ana shunday zarracha assillyator deyiladi.

Atomni dipol moment nolga teng, lekin elektronni tebranishi tufayli assillyatorni dipol momentini o'zgarishi noldan farqli deb qarash mumkin.

Demak assillyatorning o'zaro tasir energiyasini quydagicha yozamiz.

$$U_{dis} = \frac{2e^2 x_1 x_2}{r^3} \quad (2,3)$$

r - assillyator orasidagi masofa e - elektron zaryadi x_1 , x_2 - ikkta elektronlarni muvozanat holatdan chetlangandagi siljish masofasi.

Dispersion ta'sir energiyasi bo'ladi.

$$U_{dis} = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{a^2 \omega}{r^6} = \frac{a^2}{r^6} \cdot \frac{h\nu}{2} \quad (2,4)$$

ω - atomdagi elektron tebranish chastotasi.

$\frac{h\nu}{2}$ –izolyasiyalangan assillyatorning nolinci energiyasi. Shunday qilib zarrachalarning tortilishining sababi nolinci energiyaning pasayishi ekan.

Induksion ta'sir. Bu holda ham bir dipol qo'shni malekuladan o'z yo'nalishiga mos bo'lgan dipolni induksiyalaydi. Ya'ni qutubli o'zaro ta'sirlashganda qo'tubli molekularning elektr maydoni qutibsiz malekula atrofida yo'nalgan dipol momentini induksiyalaydi. Induksiyalovchi malekulani induksion

qutublanuvchanlik qancha katta bo'lsa, induksiyalangan moment ham shuncha katta bo'ladi. Induksion ta'sir energiyasini quydagicha yozamiz.

$$U_{ind} = -2I_{ind} \frac{p^2}{r^6} \quad (2.5)$$

Ko'rinib turibdiki induksion o'zaro ta'sir energiyali zarrachalar orasidagi masofaning oltinchi darajasiga teskari proporsional ekan.

Shunday qilib, Van-der Vaals ta'sir kuchlari molekular orasidagi dispersion, oreientatsion va induksion ta'sirlardan iborat.

Molekulalarning o'zaro tortishish potensialini

$$E_n = -\frac{a_1}{r_m} \quad (2.6)$$

Itarishish potensialini

$$E_n = \frac{a_2}{r^n} \quad (2.7)$$

deb belgilasak, molekulararo ta'sir potensialining umumiy ko'rinishi.

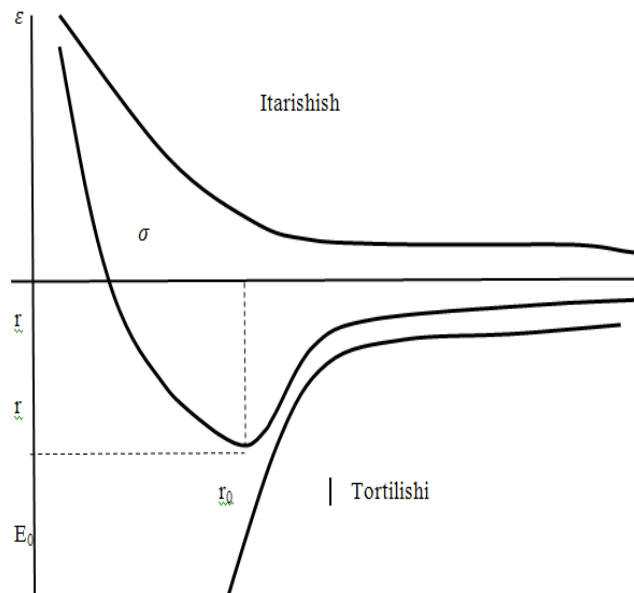
$$E_n = -\frac{a_1}{r^m} + \frac{a_2}{r^n} = \frac{a_2}{r^n} - \frac{a_1}{r^m} \quad (2.8)$$

bilan aniqlanadi.

Shunday qilib zarrachalarning o'zaro tortilishining sababi nolinchilarning energiyasining pasayishi ekan. Umumiy holda R dipol moment va qutublanuvchanlikka ega bo'lgan ta'sir energiyasi.

$$U = U_o + U_c = \left\{ \frac{2P_0'}{3} + 2aP_0^2 + \frac{3}{4}J\mathcal{L}^2 \right\} \frac{1}{6} \quad (2,9)$$

Molekulararo ta'sir potensialining molekulari orasidagi masofaga bogliq ravishda o'zgarishi grafik ravishda keltirilgan.



3-rasm Molekulararo ta'sirning o'zgarishi

3- Rasmda ko'rinadiki $r < r_0$ masofalarda itarishish kuchlari asosiy rolini o'ynaydi $r = r_0$ masofada kuchlari o'zaro bir birini kompensasiyalaydi.

Agar molekular orasidagi masofa $r < r_0$ bo'lsa, itarishish kuchlari keskin ortadi va molekular turli tomonga harakat qiladi. Binobarin, real gaz molekularining to'qnashuvi deganda xuddi bilyard sharlari kabi molekulararo elastik

to'qnashuvini emas molekular ta'sir sferasining ma'lum masofagacha yaqinlashib undan keyin turli tamonga harakat qilishini tushunmoq kerak.

Real molekularlardan bundan tashqari ta'sirning boshqa turlari, xususan, vodorod bog'lanish ham uchraydi. Ammo vodorod bog'lanishning ta'sir energiyasi Van-der Vaals ta'sir energiyasidan ancha katta va bu ta'sirning xarakterli tomonlari maxsus kurslaridan o'rganiladi. Shuning uchun biz ularga to'xtalib o'tirmayiz.

Ko'p hollarda molekulararo ta'sirni ifodalaydigan ta'sir potensialining maxsus ko'rinishidan foydalaniladi. Amalda keng qullaniladigan potensialidan biri Lennard-Jons potensialidir. Uning ko'rinish

$$E_n(r) = 4\varepsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (2,10)$$

Molekulararo ta'sir potensialining molekulari orasidagi masofaga bogliq ravishda o'zgarishi grafik ravishda keltirilgan.

1.3 Vodород bog'lanish va uning turlari

Molekulada atomlar orasida ximiyaviy kuchlar ta'sir kiladi. Bu kuchlar elektrostatik tabiatga ega bo'lib, atomlarning elektron strukturasi bog'liq.

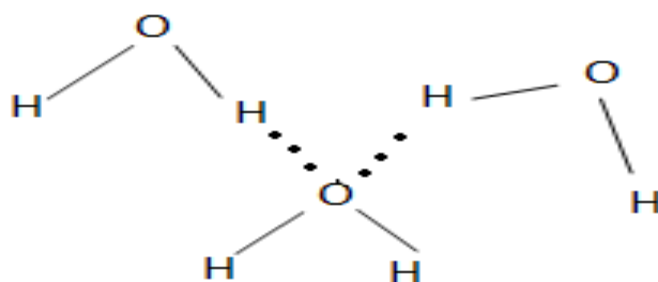
Moddaning kondensirlangan (suyuq yoki qattiq) holati atom va molekular orasida o'zaro tortishish kuchlari mavjudligidan dalolat beradi. Masalan, suyuq geliy, argon va hokazolar atomlar orasidagi o'zaro tortishish kuchlarining mavjudligiga misol bo'ladi. Bundan tashqari atom va molekular orasida itarishish kuchlari ham yuzaga keladiki, ularni ma'lum xolatdan so'ng hajmini kichraytirib bo'lmaydi.

Atom va molekular orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari birinchi navbatda Van-der-Vaals kuchlari bo'lib ularning energiyasi 0,1 dan 2 kkal/mol gacha bo'lishi mumkin. Van-der-Vaals kuchlari o'z navbatida oriyentasion (dipol-dipol), induksion va dispersion kuchlarga bo'linadi. Dipol-dipol o'zaro ta'sir qutbli molekular orasida vujudga keladi. Bunda dipol momentiga ega bo'lgan bir molekula ikkinchi dipol momentiga ega bo'lgan molekulaning elektr maydonida orentirlanadi. Dipol momentiga ega bo'lmagan molekulalarda Debay nazariyasiga ko'ra yuqori multipol (kvadropol, oktupol momentlar) bo'ladi. Yoki bir molekulaning dipol momenti ikkinchi molekulani elektr maydonini induksiyalaydi. Natijada induksion o'zaro ta'sir vujudga keladi. Indusirlangan dipolning oriyentasiyasi xaotik bo'lmasdan, doimiy dipolning yo'nalishi bilan aniqlanadi. Oriyentasion o'zaro ta'sir temperaturaga bog'liq bo'lib induksion o'zaro ta'sir temperaturaga bog'liq bo'lmaydi. Bu hollarda molekulararo o'zaro ta'sir energiyasi ular orasida masofaning oltinchi darajasiga teskari proporsional bo'ladi. Bundan tashqari inert gazlar molekulari orasida ham o'zaro ta'sir mavjud. Vaholanki, ularning elektron buluti sferik simmetrik bo'lib hech qanday elektrik dipolga ega emaslar, ular orasida induksion effekt ham vujudga kelmaydi. Atomlar yoki qutbsiz molekular o'rtasida vujudga keladigan o'zaro ta'sirni dispersion o'zaro ta'sir deyish mumkin. Sistemaning potensial energiyasining kamayish miqdori dispersion o'zaro ta'sir energiyasi bo'ladi, vujudga kelgan kuch dispersion

kuch deyiladi. Bu kuchning kattaligi sistemaning qutblanuvchanligiga bog'liq. London nazariyasiga ko'ra dispersion o'zaro ta'sirning tabiati nolinchi energiyaning mavjudligi bilan bog'liq. Bundan tashqari molekular o'rtasida rezonans o'zaro ta'sir ham vujudga keladi.

Molekularning spektral parametrlari deganda spektral chiziqning chastotasi, yarim kengligi va formasi tushuniladi. Molekular o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir kuchlari molekularning spektral parametrlarini bir muncha o'zgartiradi. Spektral chiziqning chastotasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir natijasida siljiydi (ko'p hollarda past chastotag tomon) va uning yarim kengligi ortadi. Spektral chiziqning formasi tabiatan simmetrik bo'lishi lozim. Uning assemmetrik ko'rinishga ega bo'lishiga ham asosan molekular o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'siri sabab bo'ladi.

Molekulararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan biri vodorod bog'lanishdir. Bir molekula tarkibida ximiyaviy bog'langan vodorod atomi boshqa molekularning elektromanfiy guruhi bilan yana qushimcha bog'lanish hosil qiladi. Bu bog'lanishga vodorod bog'lanish deyiladi. Vodorod atomining bir vaqtda ikkita bog'lanishda qatnashishi xususiyati XVIII asr oxirida ma'lum bo'lgan. Masalan, suv molekulasida vodorod bog'lanishni tasvirlasak. (1-rasm)



Rasm -1 , Suv molekulasida vodorod bog'lanish

Vodorod bog'lanish bitta molekula ichida bo'lishi mumkin. Bunga ichki molekulyar vodorod bog'lanish deyiladi. Masalan, orto-xlorfenol, orto-nitrofenol va hokazo molekularlarda ichki molekulyar vodorod bog'lanish kuzatiladi.

Vodorod bog'lanish bir xil yoki turli xil molekular orasida bo'lishi mumkin. Bunga molekulararo vodorod bog'lanish deyiladi.

Bu bog'lanishning tabiati quyidagicha: vodorod atomi ximiyaviy bog'lanish jarayonida o'zining yagona elektronini boshqa atomga beradi va u atomning elektron qobig'ini to'ldiradi. Natijada vodorod atomining protoni yalang'och bo'lib qoladi. Agar bu protonga biror tomondan elektromanfiy atom yaqinlashsa u bilan o'zaro tortishadi.

Vodorod bog'lanishni odatda A-H...B ko'rinishda belgilaydi. A-H guruh protonni beruvchi – donor, B guruh esa protonni qabul qiluvchi – akseptor deyiladi.

Vodorod bog'lanishli komplekslarni energiyasiga qarab shartli ravishda 3 guruhga bo'lish mumkin:

1. Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 1-2$ kkal/mol. Masalan N Gal...N₂, Hgal...SO
2. Tipik vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 2-8$ kkal/mol. Masalan suv, geloidovodorodlar dimer yoki polimerlari ...
3. Kuchli vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 9-30$ kkal/mol.

Bunga karbon kislotalari, fosfororganik birikmalar va hokazo misol bo'lishi mumkin.

1.4 Vodorod bog'lanishning tebranish spektrida naoyon bo'lishi.

Vodorod bog'lanish molekulararo ta'sirning bir turi bo'lib, uni bir molekulaning vodorod atomi, ikkinchi bir molekulaning elektro manfiy guruxi bilan qushimcha bog'lanish hosil qiladi.

Vodorod bog'lanish muommolari uning spectral namoyon bo'lishi masalalari doirasi juda keng bo'lib, ko'p ilmiy ishlarda ko'rib chiqilgan.

Vodorod bog'lanish energiyalari keng oraliqni egallaydi va elector tebranish va aylanish spektrida nomoyon bo'ladi. Ularni o'rganish infraqizil yutilish kombinatsion sochilish spektrlari va YaMR spektrlar yordamida olib boriladi.

Vodorod bog'lar ON , SN , CIN , FH va hakazo guruhlari bo'lgan molekular orasida sodir bo'ladi. Vodorod atomi qatnashayotgan guruhni A-H deb belgilash qabul qilingan.

A-H...B tipdagi vodorod bog'lanish hosil qilinganda A-H bog'lanishning ham B gruppalarining ham chastotalari o'zgaradi. Quyidagi ko'rinishli tebranishlar ko'rsatiladi.

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

$R - A \leftarrow H \rightarrow \dots B \quad \nu_d \quad A - H$ diformatsion tebranish

$R - A \leftarrow H \rightarrow \dots B \quad \nu_t \quad A - H$ aylanma tebranish

$R - A \leftarrow H \rightarrow \dots B \quad \nu_r \quad A - H$ translasion tebranish

$R - A \leftarrow H \rightarrow \dots B \quad \nu_B \quad A - H$ deformatsion tebranish

Vodorod bog'lanish tebranish spektrida kuzatiladi asosiy spektral belgilar quydagilar.

I.A-H gruppaning valent tebranish palasasi va uning obertonlari past chastotaga siljiydi. Ko'plab sistemalarda bu siljish $\Delta \nu, \nu_s$ miqdorning o'nlab foizini tashkil qiladi.

- a) Infraqizil yutilish spektrida vodorod bog'lanish ν_s palasasining integral intensivligi esa kam o'zgaradi.
- b) Kombinatsion sochilish spektrida ν_s ning intensivligi qisman ortadi.
- s) Xarorat qisman o'zgarishi ν_s palasasini chastotasi va intensivliklari keskin o'zgarishiga olib keladi.
- d) Turli hil erituvchilar ham ν_s palasa parametrlariga ta'sir qiladi.

II. A – H gruppaning ν_d defarmasion tebranishi.

- a) ν_d difarmatsion tebranish palasasi chastotasi erkin molekula chastotasiga nisbatan yuqori siljiydi. Bu holda nisbiy siljish uncha katta bo'lmaydi.
- b) ν_s – tebranish palasasining yarim kengligi va intensivligi ν_s dan farqli ravishda unchalik o'zgarmaydi.
- s) Vodorod bog'lanishning o'ziga tegishli bo'lgan yangi past chastotali tebranishlarning paydo bo'lishi, bu uzoq infraqizil oblastida kuzatiladi.

Kuchli molekulalarning praton donorlik va proton akseptorlik qobiliyatiga qarab, siljishining kattaligi 10 cm^{-1} dan 1000^{-1} gacha o'zgaradi.

Chastota siljishi bilan birga asosiy valent chiziqlarda intensivligining oshishi ham vodorod bog'lanish hosil bo'lganligining belgilardan biri hisoblanadi infraqizil yutilish spektrida A-H protoni vodorod bog'lanish tufayli qo'shni atomga siljish natijasiga bog'lanishning dipol moment ortadi. Infraqizil yutilish spektrida intensivlk esa dipol momentining kordinatalari bo'yicha o'zgarishiga proparsional bo'ladi. Kombinatsion sochilish spektrida intensivlikning o'zgarishi infraqizil yutilish spektrida kuchli emas. Chunki kombinatsion sochilish spektridan (kuchli) intensivlik qutublanuvchanlik tenzorining o'zgarishiga proparsional bo'ladi.

Oddiy sharoitda valent tebranish chiziqning kengayishi vodorod bog'lanishning ya'ni bir belgisi deb qaraladi. Kuponcha bu kengayish erkin molekula yarim kengligiga bir necha marta katta bo'lib murakkab strukturaga ega bo'lgan holda

kuzatilishi mumkin. Vodorod bog'lanishda qatnashayotgan A-H palasaning ko'p kengayishi va strukturaga ega bo'lishi sababdan holigacha o'rganilmaganda.

Vodorod bog'lanish energiyasi 4·5 kkal/mol dan oshganda A-H tebranishning formasi erkin molekula holidagi A-H tebranish formasidan farq qilla boshlaydi. Masalan $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ kompleksi HCl palasasining formasi kuchsiz vodorod bog'lanish bo'lganda, masalan, $\text{Si}_2\text{CO}\dots\text{HCl}$ kompleksdagi palasasining formasidan keskin farq qiladi.

Adabiyotda vodorod bog'lanishli komplekslarning formasi tajribadagi 4ta umumiy nazariya asosida muhokama qilinadi.

1. Orta disosiasiya

2. CHastota modlyasiyasi

3. Fermi rezonansi

4. Fluktasion nazariya

Barcha sistemalar uchun ham qo'lanilishi mumkin bo'lgan chiziqlarning kengayishi to'liq tushuntirishning umumiy nazariyaning bo'lishi mumkin emasligi ravshan chunki vodorod bog'lanishli sistemalar juda hilma-hil. SHuning uchun ham turli hil vodorod bog'lanishlarda kengayish sabablari ham har-hil deb o'ylash tabiydir.

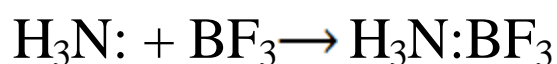
Vodorod bog'lanishning spektral namoyon bo'lishi galoidda vodorodlar misolida infraqizil yutilish spektri yordamida batafsil o'rganilgan.

Molekulalararo va ichki molekulyar ta'sir. Vodorod bog'lanish.

Yuqorida ko'rib o'tilgan ion, kovalent, metall, donor-akseptor kabi bog'lanishlar kimyoviy bog'lanishni asosiy turi hisoblanadi. Atom va molekulalar orasida bu xil bog'lanishlardan tashqari yana ikkinchi darajali bog'lanish xili-vodorod bog'lanish hamda molekulalararo tortishish kuchlari (Van-der Vaals kuchlari) ham mavjud. Oriyentatsion, dispersion va induksion kuchlar ham shular jumlasiga kiradi. Vodorod bog'lanish-kimyoviy belgilanishning o'ziga hos turidir. U molekulalararo va ichki molekulyar bo'lishi mumkin.

Molekulararo vodorod bog'lanish tarkibiga vodorod hamda kuchli elektromanfiy element- fluor, kislarod, xlor, va oltingurgut atomlari kiradigan molekular orasida vujudga keladi. Bunday molekularada umumiy elektron juft vodorod atomidan elektromanfiy element atomi tomoniga siljigan bo'ladi. Bunda musbat vodorod ioni kuchli bo'lganligi uchun boshqa atom yoki ionning bo'linmagan elektron jufti bilan o'zaro ta'sirlanib kuchsizroq bog'ni hosil qiladi. Bu bog'lanish vodorod bog'lanish deyiladi.

Masalan; Donor-akseptor bog'lanish ikki hil molekula orasida ham yuzaga chiqishi mumkin. Masalan,



Bu erda NH_3 elektro juftli donor bo'lib, BF_3 elektron juft uchun akseptordir.

CO molekulasini ham ichki donor-akseptor bog'lanish mavjuddir. Bunda uglerod akseptor, kislorod donor vazifasini bajaradi.

Odatda vodorod bog'lanish nuqtalar bilan belgilanadi va bu bilan uning kovalent bog'lanishdan ancha kuchsizroqligi ko'rsatiladi. SHunga qaramay molekularning assoslanishi ana shu bog'lanish tufayli vujudga keladi.

Lekin bu bog'lanishning energiyasi unchalik katta emas. Masalan kimyoviy bog'lanishning asosiy turlarini bog'lanish mustahkamligi 84-1042 kkal/mol bo'lsa, vodorod bog'lanishniki 0.1-42 kkal/mol.

II-BOB. AMALIY QISM.

2.1. §. MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRNI O'RGANUVCHI ASBOBLARNING ASOSIY XARAKTERISTIKASI.

1. Molekulalarning tebranma va aylanma harakatiga mos keluvchi yutilish va nurlanish elektromagnit to'lqinlar shkalasining IQ sohasida yetadi. Shuning uchun moddalarning tebranma va aylanma-tebranma harakatiga mos keluvchi spektrini yoriig'likning IQ yutilishi prinsipi asosida ishlovchi asboblarda yordamida o'rganish qulay. Bu asboblarda prizmalı yoki difraksion panjaralı bo'lib yoriig'lik manbai sifatida global ishlatiladi. Bu asboblarda ikki nurli sxema asosida ishlaydi, ya'ni globaldan chiqayotgan yoriig'lik miri maxsus ko'zgular orqali ikkiga ajraladi va bu nurlardan biri o'rganilayotgan moda orqali o'tadi. Ikkinchisi esa solishtiruvchi kyuveta orqali o'tadi. Buning ustunligi shundaki, har ikkala nur havoda, o'rganilayotgan moda eritilgan erituvchida bir xilda yutiladi. Natijada o'rganilayotgan moda yutgan yoki o'tkazgan nur bilan ikkinchi kanaldan o'tgan nur o'zaro solishtiriladi.

Bunday spektrometrlardan biri UR-20. U 400 sm^{-1} - 500 sm^{-1} gacha bo'lgan oraliqda ishlaydi. Bu oraliqda molekulalarning tebranma va aylanma-tebranma spektri joylashgan. Bu tipdagi spektrofotometrlarda spektrni qayd qilish avtomatlashtirilgan. UR-20 spektrometrning blok sxemasi rasmda keltirilgan. (Rasm A) 1-nurlanish manбайдan chiqayotgan yoriig'lik 12 o'rganilayotgan moda solingan kyuveta va 2 solishtiruvchi kyuvetalar orqali o'tib 4 modulyatorga beradi.

Navbat bilan 6 qabul qiluvchi priyemnik beradi. Fotometrik sistema yozuvchi pero bilan bog'langan va natijada o'rganilgan moda molekulalari qaysi sohada yutsa shu sohada tushayotgani yoriig'likning qancha qismi molekulaning qaysi atomining tebranma harakati hisobiga yutayotganligini qayd qiladi.

IR-20 spektrometrida dispersiyalovchi element sifatida 3 ta prizma xizmat qiladi. KVch prizmasi $400-800 \text{ sm}^{-1}$ da, NaCl- prizmasi - $800-300 \text{ sm}^{-1}$, LiF-

prizmasi $1600-500 \text{ sm}^{-1}$ da ishlaydi. Asbobning ajrata olish qobiliyati LiF prizmasida 2400 sm^{-1} oblastda 1 sm^{-1} ni tashkil qiladi.

Suyuqliklarda molekulararo o'zaro ta'sirni o'rganishda bu ajrata olish qobiliyati to'lig'cha etarli hisoblanadi. Asbobning optik sxemasi 6- rasmda ko'rsatilgan.

2. Yorug'likni kombinatsion sochilishi.

Yorug'likni kombinatsion sochilishi hodisasi 1928 yil G.S. Lansberg va L.J. Mandelshtam tomonidan kristallarda I.V Roman va K.Krishman tomonidan esa suyuqliklarda kuzatgan.

Kombinatsion sochilishda tushayotgan yorug'likni harakterlovchi chiziqlardan tashqari qushimcha chiziqlar bo'ladi. Bu tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida turadi. Yo'ldoshlar ko'rinadigan bo'lish uchun tushayotgan yorug'lik spektorida tutash bo'lmay alohida chizilgan to'plamidan iborat bo'lishi kerak. Bu hodisani quyidagi qonunlari tomonidan topilgan.

1. Yo'ldoshlar tushayotgan yorug'likning har bir chizigi yonida bo'ladi.

2. Tushayotgan yorug'lik spektral chizigining $\nu^l, \nu^m, \nu^n \dots$ chastotasi bilan yo'ldoshlardan har biri chiziqning ν^l, ν^n, ν^m chastotasi orasidan ν^l farq sochiluvchi modda uchun harakterli bo'lib, uning molekularining xususiy tebranishlari chastotalari ν^l ga teng.

$$\begin{aligned}\Delta \nu_1 &= \nu_0 - \nu^l = \nu_1^i \\ \Delta \nu_2 &= \nu_0 - \nu^m = \nu_2^i \quad (4,1) \\ \Delta \nu_3 &= \nu_0 - \nu^n = \nu_3^i\end{aligned}$$

3. Yo'ldoshlar uygotuvchi chiziqdan ikki tomondan simmetrik yotuvchi chiziqning ikki sistemadan iborat, yani

$$\nu_0 - \nu_2 = \nu_1 - \nu_0 \quad (4,2)$$

Bu erda ν_2 uygotuvchi chastotalardan uzoqroq to'liqin tomonda joylashgan yuldoshlarning chastotalari, ν uygotuvchi chastotalardan ikkinchi tomonda yotgan yo'ldoshlarning chastotalarini bildiradi. Spekrning qizil qismida yotgan ya'ni yaqin joylashgan „qizil” yo'ldoshlar „binafsha” yo'ldoshlardan ancha intensivdir.

4. Temperatura oshganda „binafsha” yo'ldoshlarning intensivligi tez ortadi. Temperatura ko'tarilgan sari uygotilgan molekulalar soni tez ko'payadi, shunga yarasha binafsha yo'ldoshlarning intensivligi tez ortishi kerak.

Yorug'likni sochilishining bu turi yuz berganda tushayotgan yorug'lik chastotasi o'zgarib borishi kerak. Boshlangich chastotali yorug'lik bilan birga o'zgargan chastotali chiziqlar ham paydo bo'lishi kerak. Demak sochilgan yorug'likning chastotasi tushayotgan yorug'lik chastotasi bilan molekulalar ichida bo'ladigan tebranishlar chastotasining kombinatsiyasidan tarkib topadi. Shuning uchun bu sochilish kombinatsion sochilish deyiladi.

Yorug'likni kombinatsion sochilishi hodisasi soddalashtirilgan kvant nazariyasi asosida quyidagicha tushuntirish mumkin.

Odatdagi sharoitda modda molekulalarining aksariyati uyg'onmagan holtda bo'ladi. Ana shunday holatdagi molekulalarga $\mathcal{E} = h\nu$ kvant energiyaga ega bo'lgan energiya tushganda, bu kvant o'z energiyasining bir qismini katta bulgan kvantga aylanadi, ya'ni bu nolda „qizil” yo'ldoshlar hosil bo'ladi.

Ikkinchi holda kvant uyg'ongan molekula bilan uchrashadi, u holda molekula o'z energiyasini bir qismini kvantga beradi. Natijada chastota va energiya katta bo'lgan va to'liqin zichligi kichik bo'lgan kvant, ya'ni „binafsha” yo'ldoshlar hosil bo'ladi.

Odatdagi sharoitda binafsha yo'ldoshlarning intensivligi qizil yo'ldoshlar intensivligidan kichik bo'ladi. Bunga sabab, moddaning uygonmagan atom va molekulalar sonidan ko'p bo'ladi.

Temperatura oshishi bilan binafsha yo'ldoshlar intensivligi tez ortadi. Qizil yo'ldoshlar intensivligi temperaturani oshishi bilan sezilarli o'zgarmaydi yoki bir oz kamayadi.

Molekula qisqa vaqt oraliqda turli energetik sathlar orasidagi kvant ulushlarini 2ga bo'lish mumkin

1. Agar molekula o'zini kvant chiqarib o'zgartilsa, nurlanishsiz va aksincha.

2. Faton urib o'zgartirilsa nurlanishli bo'lish mumkin.

Molekulaga elektromagnit nurlanish maydoni ta'sir qilsa, molekulalar mumkin bo'lgan utishlarda energiya kvantini nurlantirilsa, bunday o'tishlarda energiya kvantini nurlantirilsa, bunday o'tishlar tanlash qoidalariga mos bo'lib, yorug'likning yutilishi kuzatiladi. Shuning uchun molekula energiyasi bo'lgan uyg'onmagan m holatga ikki yo'l bilan qaytib kelishi mumkin.

1) Ixtiyoriy (spontan) nurlanish

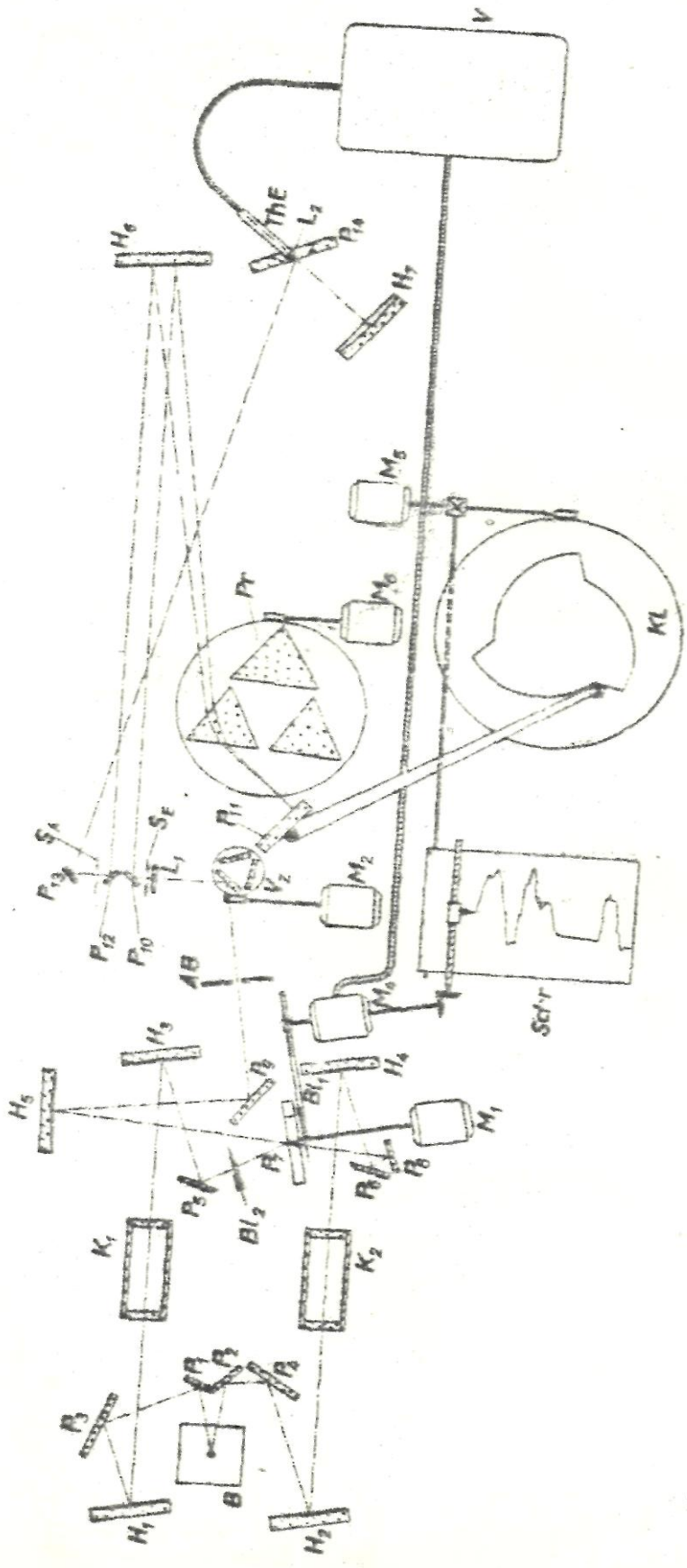
2) Majburiy nurlanish

Asosan ikki fatonli o'tishlarda molekula bilan fatonni har bir elementar ta'sirlashuvda bir vaqtning energiyasi hosil bo'lgan 2ta faton yutiladi va nurlanadi. Ular energiyasining yig'indisi esa uyg'ngan molekulalarning energiyasi yigindisiga teng.

$$hev = hev_1 - hev_0 \quad (4,3)$$

Moddaga monaxramatik yorug'lik tushganda uni katta bo'lmagan qismi esa turli yo'nalishlar bo'yich sochiladi. Sochilgan yorug'likda uchta nurlanish chastotasi kuzatiladi.

$\nu_0, \nu_0 - \nu_1$ $\nu_0 + \nu_1$ sochilishda chastotasi o'zgarmay qolgan qismini Releycha sochilish chastotasi bo'lib, o'zgargan qismi esa kombinatsion sochilish chizigi deyiladi.



UR-20 spektrometrining optik sxemasi

III. Bob. Ilmiy natijalar va ularning tahlili.

3.1 CD₃ molekulasi va uning tebranish spektri.

CD₃F molekulasi C_{3v} simetriyaga ega bo'lib, uchunchi tartibli simetriya o'qi C-F bog'lanish orqali o'tgan i=3N-6 ko'ra bu molekuladagi umumiy tebranishlar soni 9 ta bo'lish lozim. Shulardan 3 tasi ikki marta ifodalanganlangan ya'ni tebranish spektrida jami 6 ta chiziq kuzatiladi.

Ular quyidagi 1- jadvalda keltirilgan.

№	Teb	Tebranish formasi	KSS ν sm ⁻¹	IQS ν sm ⁻¹	Tajriba	$\Delta \nu_{1/2}$
1	A ₁	q (C-D)	2089	2089,7	2088	9
2	A ₁	α (DCD)	1137	1136,9	1133	11
3	A ₁	Q (C-F), α (DCD)	991	991,8	991	8
4	E	q (C-D)		2258	2258	18
5	E	α (DCD)		1073		
6	E	δ (DCD)		911		

E simetriyadagi tebranishlar bir xil energiya bilan bir vaqitda sodir bo'ladi.

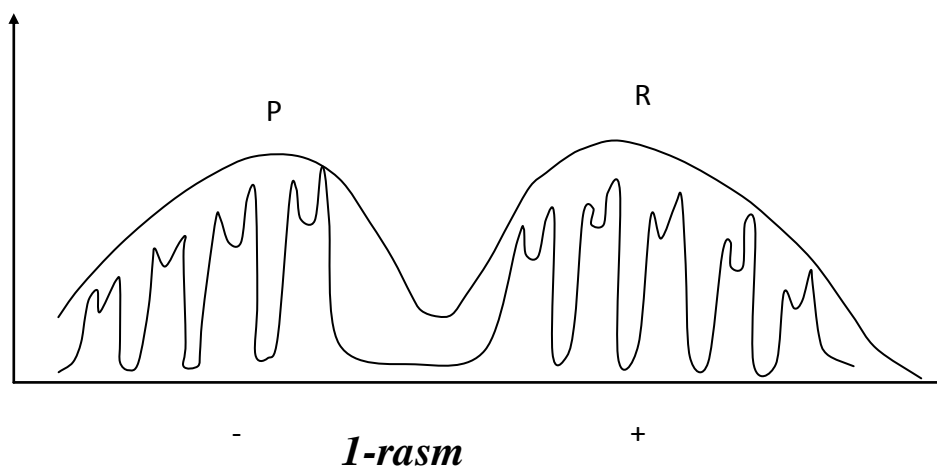
Jadvaldan ko'rinadiki ν_3 tebranish A₁ simetriyada bo'lib bular C-F uzunlikning uzgarishi bilan birga DCD deformatsion tebranishga xam ta'siri mavjud .

Ushbu molekula inert eruvchi suyuq argonda eritilganda kuzatiladigan tebranish

3.2 HCl molekulasining tebranma aylanma spektri

Vodorod xlorid molekulasini ikki atomli molekula bo'lib, gaz holatida yadrolar orasida masofaning o'zgarishi ya'ni tebranma harakat bilan bir vaqtda molekula o'qiga perpendikulyar bo'lgan o'qlar atrofida molekula aylanma harakat qiladi. Shuning uchun tanlash qoidasiga ko'ra P va R qanotlardan iborat bo'lgan tebranma aylanma strukturalarga ega bo'lgan palasa kuzatiladi. Gazning bosim ortib borishi bilan aylanma strukturaga ega bo'lgan chiziqlar bir-biriga qushilib P va R qanotdan tashkil topgan palasa kuzatiladi. 1-rasm

HCl molekulasining turli erituvchilardagi spektron parametrlari quyidagi 2-jadvalda keltirilgan



Jadval -2

	Gaz	Ar (T=90 K)	Kr (T=120K)	Xe (T=180K)	CCl ₄ (T=300K)	Xe (T=200K)
ν (cm ⁻¹)	2886	2869	2861	2848	2833	2550
A (cm ⁻² s ⁻¹ mol ⁻¹)	19	27	34	50	47	57

HCl biror bir suyuqlikda eritilganda IQ yutilish spektorida P va R qanot bilan birga tanlash qoidasiga ko'ra taqiqlangan Q komponenta ham hosil bo'ladi. Erituvchining aktivligi ortib borishi bilan Q komponentaning intensivligi ham ortib boradi. 2-rasm.

Ma'lumki Ar, Kr, Xe gazlari enert gazlar hisoblanadi. Chunki bu atomlarning elektron qobiqlari to'lgan bo'lib tabiatda atomlar holida uchraydi. Bu gazlarni past temperaturada suyultirganda ham atomlar holida bo'ladi. Shuning uchun ham erituvchi sifatida foydalanilganda molekula bilan ta'sirlashish energiyasi minimal qiymatga ega bo'ladi. Nazariy va amaliy izlanishlar ko'rsatadiki erituvchilarning aktivligi uning sindirish ko'rsatkichiga bog'liq. Ma'lumki $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ ya'ni sindirish ko'rsatkich atom va molekulalarning elektr xossasiga bog'liq. Atom gazlarning erituvchi sifatidagi aktivligi atomlarning qutublanuvchanligining o'zgarishi tufayli vujudga keladi

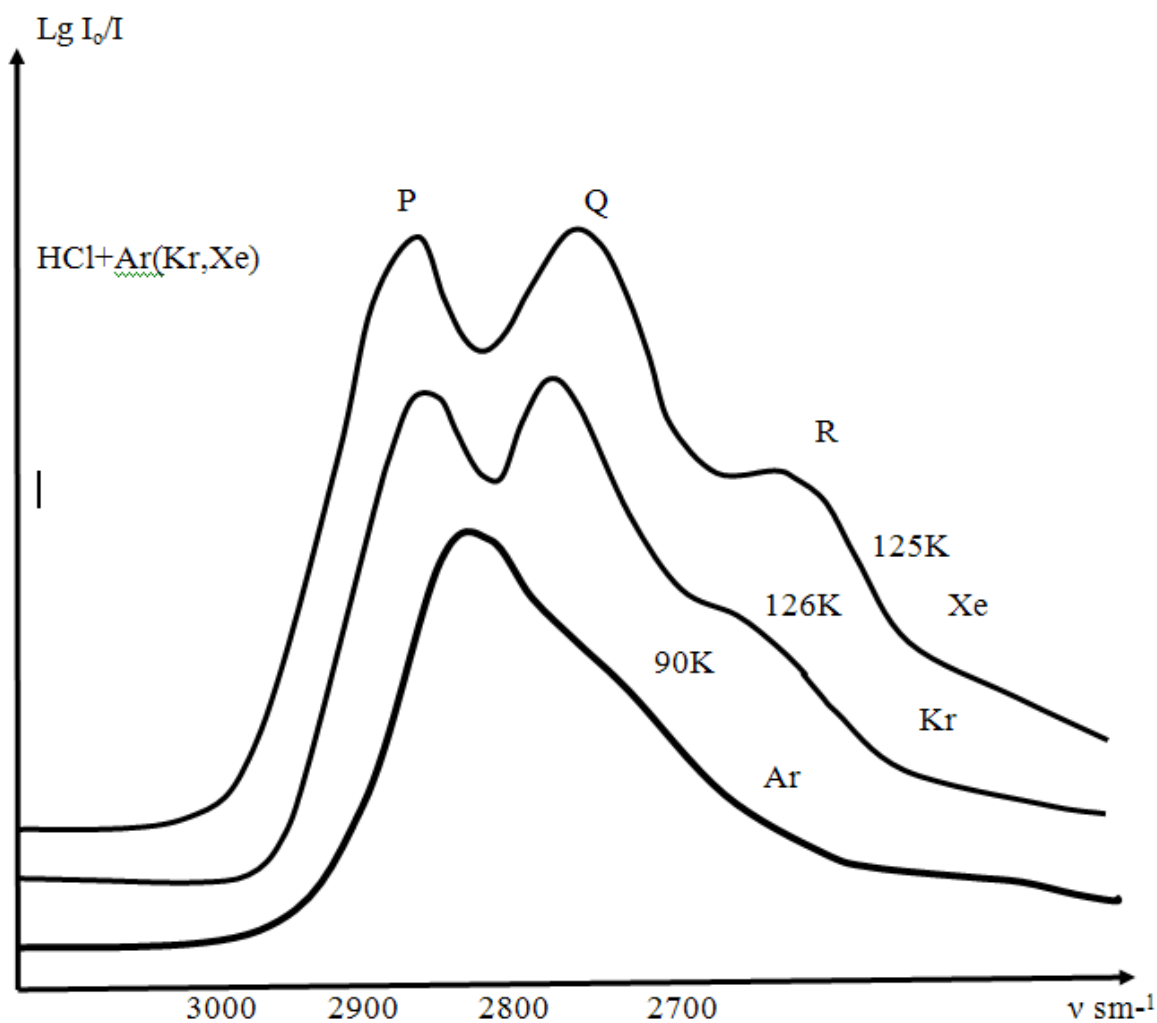
3.3 CD₃F va HCl molekulalari orasida vodorod bog'lanish hosil bo'lishi va uning tebranish spektrida nomoyon bo'lishi.

CD₃F va HCl molekulalarini o'zaro aralashtirilganda CD₃F molekul-asidagi elektro manfiyligi yuqori bo'lgan fluor bilan HCl molekulasidagi vodorod atomi orasida qushimcha bog'lanish hosil bo'ladi. Bunday bog'lanish hosil bo'lishi natijasida birinchi navbatda HCl molekulasining tebranma aylanma spektri keskin o'zgaradi.

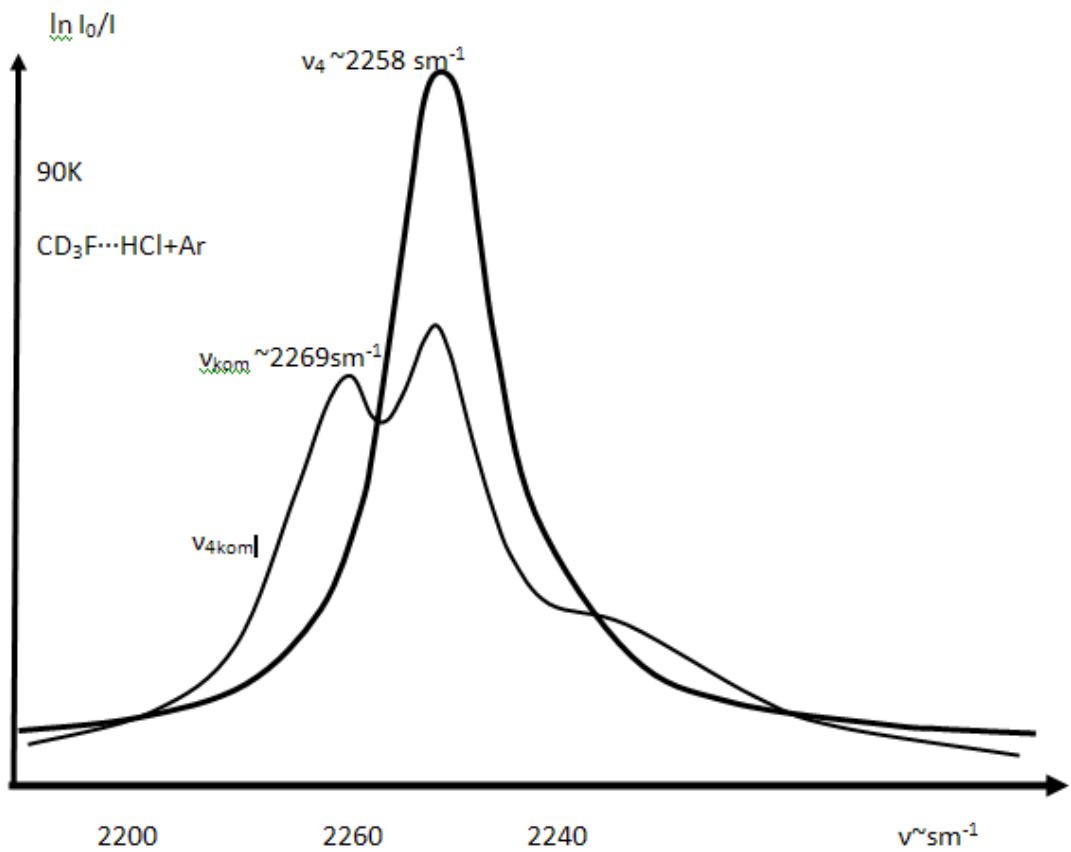
Agar HCl molekulasining suyuq organdagi eritmasida $\nu_0 \sim 2861 \text{ sm}^{-1}$ bolsa (3 -rasm) CD₃F va HCl suyuq organda eritilganda bu palasaning formasi keskin uzgaradi va $\nu_{kom} \sim 2804 \text{ sm}^{-1}$ chastotada yarim kengligi $\Delta \nu_{1/2} \sim 10 \text{ sm}^{-1}$ bo'lgan ingichka simetrik palasa kuzatiladi. Vaholanki erkin HCl ning tebranma aylanma palasasining yarim kengligi $\Delta \nu_{1/2} \sim 100 \text{ sm}^{-1}$ ga teng edi. HCl molekulasi CD₃F bilan kompleks hosil qilganda yarim kengligining keskin kamayishi HCl ning aylanma harakatining tormozlanishi bilan tushuntiriladi. Ya'ni erkin HCl molekulasining enersiya moment kompleks xosil bo'lishi natijasida keskin ortib ketadi va natijada u aylanma harakat qila olmaydi. Faqatgina vodorod va xlor otomi orasidagi tebranma harakatiga tegishli palasa 2804 sm^{-1} da kuzatiladi. Bunda vodorod bog'lanish kompleksining bog'lanish energiyasi ham kichik shuning uchun unga tegishli palasaning yarim kengligi ham kichkina.

CD_3F va HCl molekulari orasida vodorod bog'lanish hosil bo'lishi natijasida CD_3F molekulasining C-F tebranish palasasi past chastota tomonga 16 sm^{-1} ga siljiydi va $\nu_{3kop} \sim 975 \text{ sm}^{-1}$ da kuzatiladi (4rasm). Shuningdek HCl defarmatsion tebranishga tegishli ν_2 palasa past chastota tomon 12 sm^{-1} tomonga siljiydi. Bu palasaning yarim kengligi ham kamayadi.

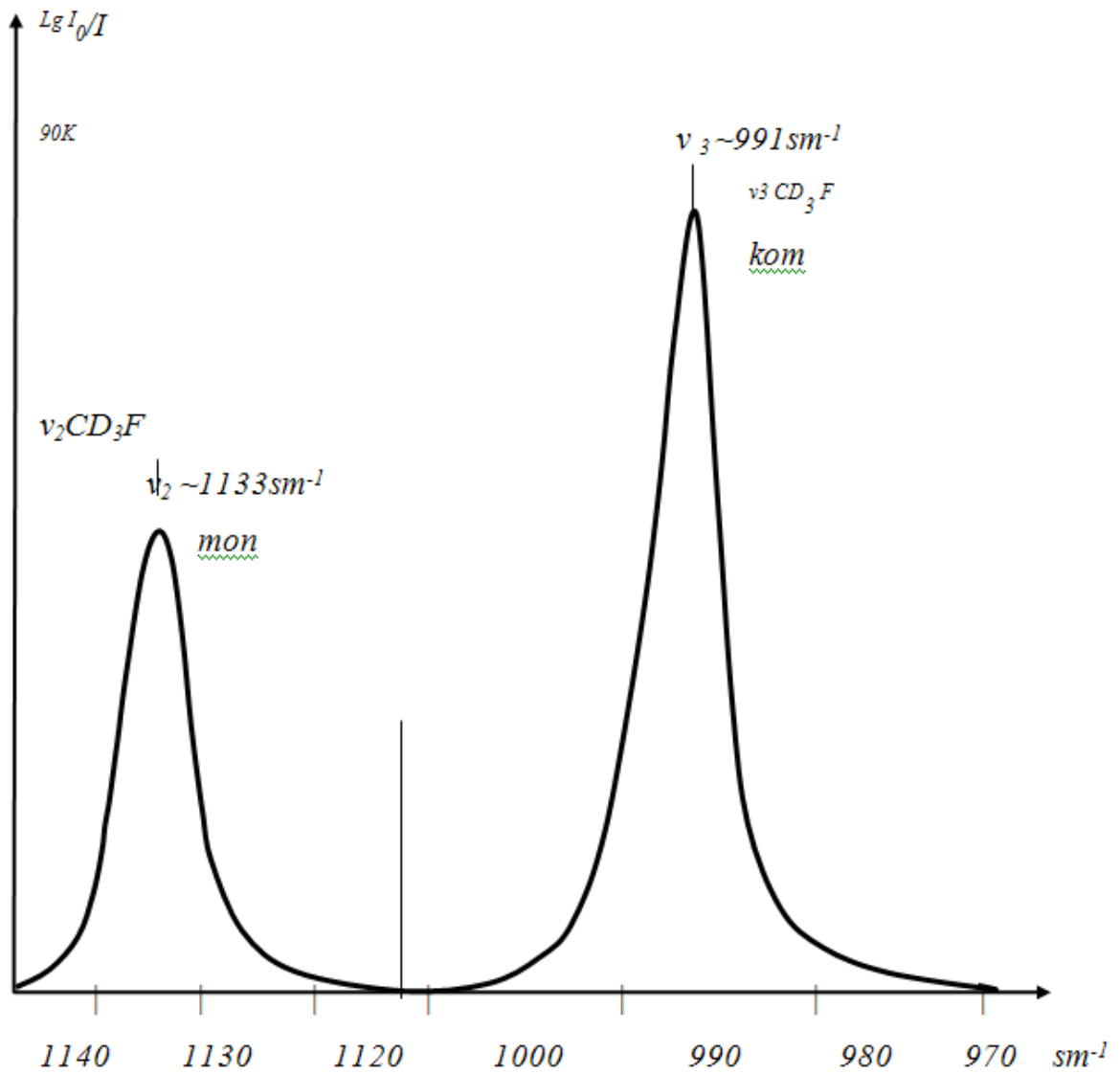
CD_3F ning assimmetriali C-D valent tebranish palasasi esa $\text{CD}_3\text{F} + \text{HCl}$ kompleksida o'zining spektri paramerlarini o'zgartirmaydi. Lekin ikki marta aylanishiga E simetriyali C-D tebranish palasasi esa yuqori chastota tomonga $\sim 11 \text{ sm}^{-1}$ ga siljiydi. Demak o'zaro tasir energiyasi kichik bo'lgan vodorod bog'lanish hosil bo'lishi natijasida o'zaro tasirlashuvchi molekularlarning spektral parametrlari o'zgarar ekan. Bu o'zgarishlar tebranish spektrlarida ham yaqqol ko'rinadi.



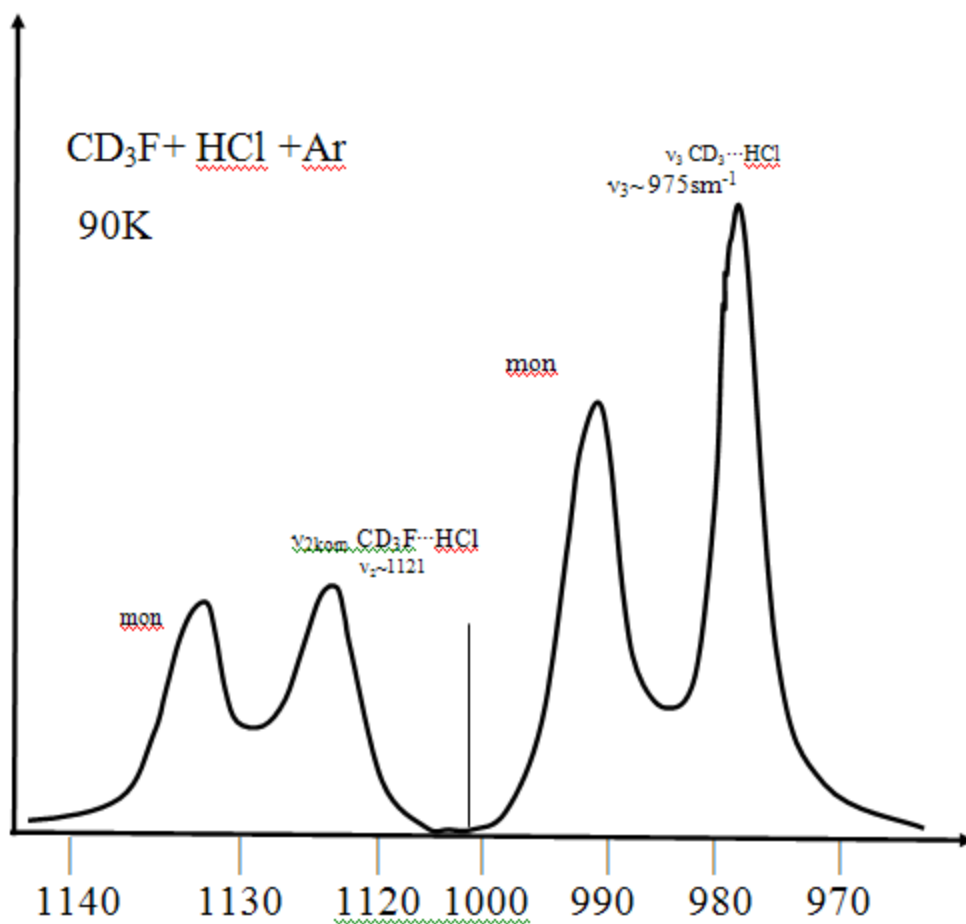
1-rasm. HCl molekulasining turli xil inert erituvchilarda eritilgandagi IQ yutilish spektri.



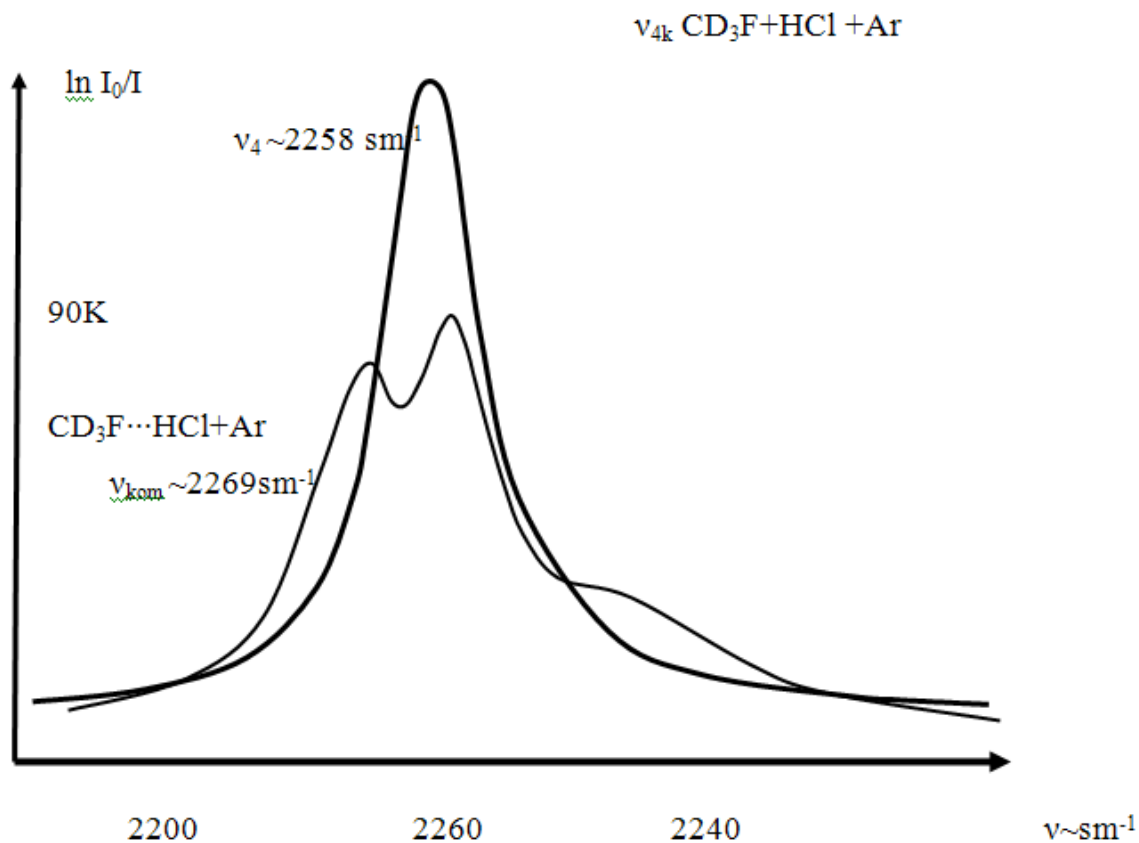
Rasm. CD_3F molekulasining suyuq Ar dagi va kompleks hosil qilgandagi ν_4 polosasining yutilish spektri.



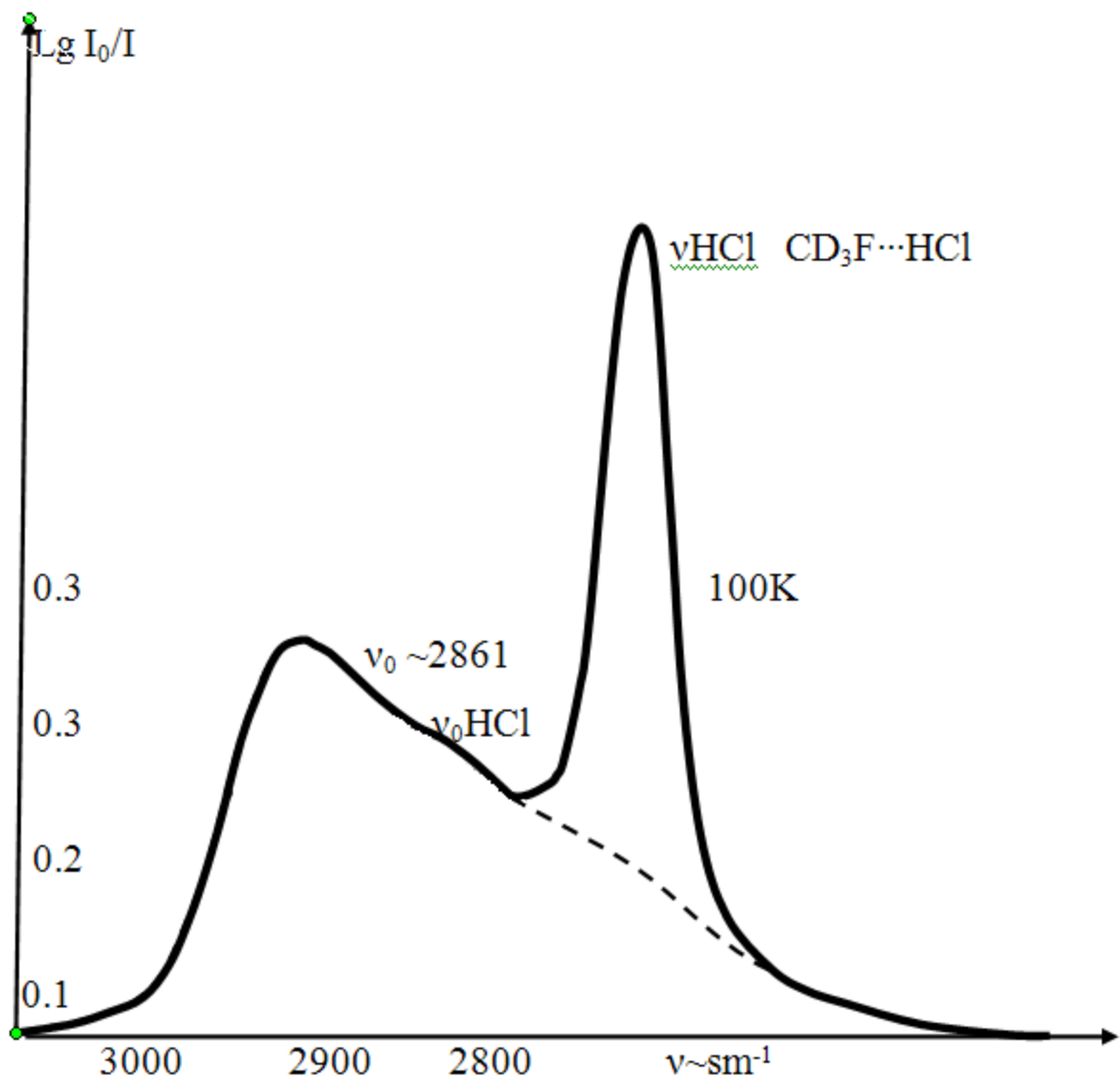
4-rasm CD_3F molekulasining sūyuq Ar dagi ν_2 va ν_3 IQ yutilish spertri



5-rasm. CD₃F molekulasining suyuq Ar dagi va HCl molekulasi bilan kompleks hosil qilgandagi ν_2 va ν_3 polasasining yutilish spektri.



4-rasm. CD_3F molekulasining suyuq Ar dagi va kompleks hosil qilgandagi ν_4 polosasining yutilish spektri.



3-rasm. HCl molekulasi Ar dagi va kompleks hosil qilgandagi H-Cl ν_0 polosasining tebranish spektri.

Xulosa

1. Molekulararo o'zaro ta'sir va uning tabiatini o'rganishga doir adabiyotlar bilan tanishildi.
2. Molekulararo o'zaro ta'sir jumladan vodorod bog'lanishli komplekslarni o'rganuvchi spectral asboblarning ishlash prinsipi bilan tanishildi.
3. CD_3F molekulasiining spectral parametrlari tajribada aniqlangan natijalar bilan tanishib o'rganildi.
4. CD_3F va HCl molekulari o'rtasida vodorod bog'lanish bo'lganda o'zaro ta'sirlashuvchi molekularning spectral parametrlari o'zgarishi aniqlangan.
5. CD_3F molekulasida molekulararo vodorod bog'lanish tufayli nafaqat C-F guruhining balki C-D va DCD guruhlarining ham spectral parametrlari o'zgarishi ko'rsatilgan.
6. $CD_3F + HCl$ kompleks hosil bo'lish natijasida HCl molekulasiining tebranma –aylanma palasaning yarim kengligining keskin kamayishi HCl molekulasiining kompleks hosil bo'lish natijasida inersiya momentini ortishi tufayli aylanma harakatining tormuzlanishi bilan tushintiriladi

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. M.A.Yelyashevich. Atomnaya i molekulyarnaya spektroskopiya, M.1962, s.891.
2. G.Gersberg. Spektры i stroyeniye dvuxatomnykh molekul. IL. 1949.
3. G.Gersberg. Kolebatelnyye i vrashatelnyye spektры mnogoatomnykh molekul II.M.1949.
4. M.V.Volkenshteyn. Stroyeniye i fizicheskiye svoystva molekul. Izd. AN SSSR. 1955.
5. M.V.Volkenshteyn, L.A.Gribov, M.A.Yelyashevich, B.I.Stepanov. Kolebaniya molekul. M.1972, 699 s.
6. I.Brandmyuller, G.Mozer. Vvedeniye v spektroskopiye kombinatsionnogo rasseyaniya sveta. "MIR" M.1964.
7. L.M.Sverdlov, M.A.Kovner, Ye.P.Kraynov. Kolebatelnyye spektры mnogoatomnykh molekul. "Nauka" M.1970.
8. V.I.Malishev. Vvedeniye v eksperimentalnuyu spektroskopiye. LGU, 1973.
9. N.G.Baxshiyev. Vvedeniye v molekulyarnuyu spektroskopiye. LGU, 1974.
10. Dj.Pimental, O.Mak Klelan. Vodorodnaya svyaz. M.1964.
11. Xomchenko. G.P . Oliy o'quv yurtlariga kiruvchilar uchun. Ximiyadan qo'llanma. Tosh. O'qituvchi 1985-y 55-80 bet.
12. Murodov G' Fizika- matematika Fanlari nomzodligi dissertasiyasilenin-grad 1984-y
13. Jo'rayev O' Molekulyar fizika Samarqand 2004-y 137-143bet.
14. Murodov G'. Atom va Molekulyar spektroskopiya. Samarqand 2004-y