



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

**ALISHER NAVOIY NOMIDAGI
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

**FIZIKA FAKULTETI FIZIKA YO'NALISHI
«OPTIKA VA SPEKTROSKOPIYA» KAFEDRASI**

UMAROV OTABEK ABDULLAEVICH

**NITROBENZOL VA UNING ERITMALARIDA
MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLARNING SPEKTRAL
NAMOYON BO'LISHINI O'RGANISH**

**“5140200-FIZIKA” TA'LIM YO'NALISHI BO'YICHA BALAKAVR DARAJASINI
OLISH UCHUN**

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Ilmiy rahbar: f.-m.f.d.
prof. A.Jumabayev

«__» _____ 2015 yil

Bitiruv malakaviy ishi Optika va spektroskopiya kafedrasida bajarildi.
Kafedraning 2015 yil _____dagi majlisida muhokama qilindi va himoyaga
tavsiya etildi (bayonnoma №____)

Kafedra mudiri:

prof. A.Jumabaev

Bitiruv malakaviy ishi YaDAKning 2015 yil «__» _____dagi majlisida
himoya qilindi va _____ball bilan baholandi (bayonnoma № ____).

YaDAK raisi:

A'zolari:

SAMARQAND – 2015



MUNDARIJA

	Kirish	3
	I BOB. NAZARIY QISM	5
1.1 §.	Molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari va ularning turlari.....	5
1.2 §.	Yorug'likning kombinatsion sochilishi	12
1.3 §.	Kombinatsion sochilish spektrining intensivligi.....	19
1.4 §.	Noempirik hisoblashlarda molekulalarning elektron tuzilishini hisoblash usullari.....	23
	II BOB. TAJRIBA QURILMASI TAVSIFI	30
2.1 §	DFS-52 spektrometrning tuzilishi va ishlash prinsipi	30
2.2 §	Tadqiqot obyektni tanlash va moddalarni eksperimentga tayyorlash .	33
2.3 §	Kvanto-kimyoviy hisoblashlarni baholash va uning xatoligi.....	35
	III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI ..	38
3.1 §	Kombinatsion sochilish spektrlarida xloroformning izotrop va anizotrop tashkil etuvchilarini o'rganish	38
	Xulosalar	44
	Adabiyotlar	45



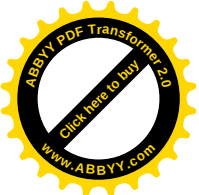
KIRISH

Ishning dolzarbligi: Suyuqliklar va ularning eritmalarini amaliyotda xususan qishloq xo'jaligida, sanoatda, ishlab chiqarishda qo'llanilishi tufayli ularning xossalari chuqur o'rganish zaruriyati paydo bo'ladi. Shuning uchun suyuqliklarning molekulyar tuzilishi va fizik-ximik xossalari bilan bog'liq masalalarni kompleks o'rganish bugungu kunda dolzarbdir. Moddaning asosiy xususiyatlari va fizikaviy tabiatini o'rganishda molekulalararo o'zaro ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun bizda kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutulish usullari mavjud. Biz kombinatsion sochilish usulini tanladik. Kombinatsion sochilish spektrlari yordamida o'rganilgan tajriba natijalarini nazariy hisoblashlar yordamida o'rganish bu tajriba natijalarini yanada mukammal tushinib olish imkoniyatini yaratadi. Molekulalararo o'zaro tasirlarni nazariy hisoblashlar yordamida o'rganish bo'yicha ko'p yillardan buyon ilmiy izlanishlar olib borilmoqda va bu sohada bir qancha ishlar qilingan.

Hozirgi vaqtgacha suyuqliklar va ularning turli eritmalarining xossalari anomalyasi molekulyar manzarasi to'lig'icha yechimini topgan emas. Suyuqliklar va ularning aralashmalari oziq-ovqat va boshqa sanoat tarmoqlarida, organizmlarning hayot faolyatida muhim o'rin egallaydi, shuning uchun ham suyuqliklar va ularning turli eritmalarini o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir.

Bitiruv malakaviy ishining vazifasi: Molekulalararo o'zaro ta'sir to'g'risida kombinatsion sochilish spektrlaridan foydalanib, qo'shimcha ma'lumotlar olishdan iborat. Bu ishda biz nitrobenzol va uning geksan bilan aralashmasini kombinatsion sochilish spektrlari yordamida o'rganish va xulosaga kelishdan iborat.

Bitiruv malakaviy ishining maqsadi: Kombinatsion sochilish spektrlari va kvanto-kimyoviy hisoblashlar orqali nitrobenzol va ularning eritmaları misolida molekulalararo vodorod bog'lanishning spektral namoyon bo'lishi haqida yangi ilmiy ma'lumotlar olishdan iborat. Shuningdek, kvanto-kimyoviy hisoblashlarda



nitrobenzol molekularining o'zaro oriyentasiyasi, bog' uzunliklari, zaryad taqsimlanishi, tebranish chastotalari va dimer hosil bo'lish energiyalarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqot usuli: Yorug'lining kombinatsion sochilishi va nazariy kvantokimyoviy hisoblashlar

Tadqiqot obyekti: Ushbu bitiruv malakaviy ishidagi tadqiqotlar nitrobenzol va uning eritmasida o'tkazildi. Kombinatsion sochilish spektrlari va kvantokimyoviy hisoblashlar molekulyar agregatlar hosil bo'lish mexanizmlarini tushuntirishda mavjud bo'lgan muammolarni yechish uchun xizmat qiladi.

Tadqiqot ishining ilmiy yangiligi Toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari o'zaro mos tushmas ekan. Nitrobenzolni inert erituvchi geksanda eritganimizda konsentratsiya oshib borishi bilan parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining maksimumlari yuqori chastota tomonga siljib, yarim kengliklari sezilarli ravishda kamayib borar ekan. Nitrobenzolni geksan eritmasida konsentratsiya oshishi bilan parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari orasidagi farq kamayib borar ekan. Kvantokimyoviy hisoblashlar ko'rsatdiki, nitrobenzol molekulari o'zaro ikki xil molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan.

Bitiruv malakaviy ishi – kirish, 3 ta bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat bo'lib, ish 50 sahifada bayon qilingan.



I BOB. NAZARIY QISM

1.1 §. Molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari va ularning turlari

Moddalarning asosiy xususiyatlarini va fizik tabiatini o'rganishda molekulalararo o'zaro ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirlarning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli xil optik usullar qo'llaniladi. Moddalarning xossalari uning qanday molekulalardan tuzilganligiga va bu molekulalar o'zaro qanday joylashganligiga bog'liq.

Fizika, kimyo va biologiyadagi ko'pgina fundamental masalalarni hal qilishda moddadagi molekulalarning miqdorini, ularning tuzilishini va boshqa xossalarini keng temperatura, bosim va konsentrasiya intervalida hamda turli agregat holatlarda bilish talab etiladi. Bog'lanishlar orasidagi qonuniyatlarni aniqlash, xarakterli va qat'iy agregatlarni ajratish suyuqliklarning molekulyar tuzilish mexanizmlarini o'rganishda muhim ahamiyat kasb etadi [1]. Molekulararo o'zaro ta'sirning turlicha turlari mavjud bo'lib ularni umumiy holda 2 guruhga bo'lish mumkin: universal va spetsifik.

Universal o'zaro ta'sir deyarli hamma vaqt mavjud bo'lib unga Van-der-Vals kuchlari kiradi, bu tortishish va itarish, orientatsiyalanish, induksion, dispersion tabiatga ega bo'ladi [1-3]. Universal o'zaro ta'sir ma'lum bir yunalishga ega bo'lmaydi. Molekulararo o'zarota'sirning energiyasi o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning fizik xossalariga (dipole moment, qutblanuvchanligiga) bog'liq bo'ladi. Molekulada atomlar orasida ximiyaviy kuchlar ta'sir qiladi. Bu kuchlar elektrostatik tabiatga ega bo'lib, atomlarning elektron strukturasi bog'liq.

Moddaning kondensirlangan (suyuq yoki qattiq) holati atom va molekulalar orasida o'zaro tortishish kuchlari mavjudligidan dalolat beradi. Masalan, suyuq geliy, argon va hokazolar, atomlar orasidagi o'zaro tortishish kuchlarining mavjudligiga misol bo'ladi [1]. Bundan tashqari atom va molekulalar orasida itarishish kuchlari ham yuzaga keladiki, ularni ma'lum holatdan 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 orientatsion (dipol-dipol), induksion va dispertsion 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 (kvadrupol, oktopol momentlar) bo'ladi yoki bir molekulaning dipol momenti ikkinchi molekulani elektr maydonini induktsiyalaydi. Natijada induksion o'zaro ta'sir vujudga keladi. Indutsirlangan dipolning orientatsiyasi xaotik bo'lmasdan, doimiy dipolning yo'nalishi bilan aniqlanadi. Orientatsion 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 proportsional 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 potentsial 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 nolinch energiyaning mavjudligi bilan bog'liq. Bundan tashqari molekular o'rtasida rezonans o'zaro ta'sir ham vujudga keladi [2]. Molekulaning spektral parametrlari deganda spektral chiziqlarning chastotasi, yarim kengligi va formasi tushuniladi. Molekular o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir kuchlari molekulaning spektral parametrlarini bir muncha o'zgartiradi. Spektral chiziqlarning chastotasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir natijasida siljiydi (ko'p hollarda past chastotaga tomon) va uning yarim kengligi ortadi. Spektral chiziqlarning formasi tabiatan simmetrik bo'lishi lozim. Uning assemmetrik ko'rinishga ega



bo'lishiga ham asosan molekulalar o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'siri sabab bo'ladi. Atomlar orasidagi, istalgan ikkita molekula orasida ham molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari deb nomlanuvchi elektr kuchlari ta'sir qiladi.

Molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari ko'pincha Van-der-Vaals kuchlari deb ataladi. Ular modda agregat holatining o'zgarishini, absorptsiya hodisasini tushintiradi va fazalar bo'linish chegarasida yuz beruvchi jarayonlarda asosiy rol o'ynaydi [2]. Molekulalararo kuchlar elektrostatik tabiatga ega. Ular tortishish va itarishish kuchlaridan iborat. Itarishish har xil molekulalarning elektron qobiqlarining o'zaro ta'siri bilan aniqlanadi, tortishish esa ularning dipol moment va qutblanuvchanligiga bog'liqdir. Molekulalararo kuchlar qisqa ta'sirlashuvchi kuchlar hisoblanadi va zarrachalar orasidagi masofaning o'sishi bilan tortishishga nisbatan itarishish tez kamayadi. Endi bu kuchlar ustida to'xtalib o'tamiz. Van-der-Vaals o'zaro ta'sirning energiyasi bir necha kilokolloriyani tashkil qiladi.

Oriyentasion ta'sir. Molekulalar elektr xususiyatining asosiy xarakteristikalarini uning dipol momenti r va qutblanuvchanligi α dir. Bu kattaliklar molekulalar o'rtasidagi o'zaro ta'sir kuchini aniqlaydi. Bu kuchlar molekulalar o'rtasidagi masofa kamayganda ularni bog'laydi, gazlar suyuqlikka aylanadi va h.k. Molekulalarning bir – birini tortishiga sabab nima? Bunga javob berish uchun avval qutbli molekulalarni qaraymiz. Bunday molekulalarda (+) va (-) zaryadlarning joylashishi har xil bo'lishiga qaramasdan, ular o'zaro elastik kuch bilan tortishishlari mumkin.

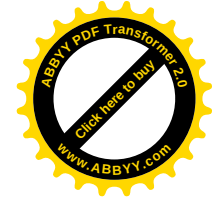
Turli ishoraga ega bo'lgan zaryadlarning o'zaro tortishish va bir xil ishoraga ega bo'lgan zaryadlarning itarishish energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U = - \frac{e^2}{(r + 2l)} - \frac{e^2}{r} + \frac{2e^2}{(r + l)}. \quad (1)$$

(1) ni boshqacha ko'rinishda ham yozish mumkin:

$$U = - \frac{2e^2 l^2}{(r + 2l)(r + l)r} \quad (2)$$

Agar $l \ll r$ deb olsak, u holda (1) ni quyidagicha yozish mumkin:



$$U = - \frac{2 e^2 l^2}{r^3} . \quad (3)$$

Ma'lumki, molekulaning dipol momenti $r=el$. Bundan:

$$U = - \frac{2 p^2}{r^3} . \quad (4)$$

Demak, oriyentasion ta'sir energiyasi:

$$U_{op} = - \frac{2 p^2}{r^3} . \quad (5)$$

Agar o'zaro ta'sir etuvchi molekulalarning dipol momentlari har xil bo'lsa, (5) formulani quyidagicha yozamiz:

$$U_{op} = - \frac{2 p_1 p_2}{r^3} \quad (6)$$

Issiqlik xarakati molekulaning oriyentasiyasiga ta'sir qiladi. Xuddi shuningdek, bu harakat oriyentasion ta'sir energiyasiga ham ta'sir ko'rsatadi. Shu tufayli oriyentasion ta'sir energiyasini bilish uchun issiqlik xarakatining ta'sirini hisobga olish kerak. Bu ta'sirni hisobga olish uchun α qutblanuvchanlikka ega bo'lgan sistemaning kuchlanganligi E bo'lgan maydondagi qutblanishini qaraymiz. Bunday maydon ta'sirida induksiyalangan dipol momenti r hosil bo'ladi. Dipolning ana shu maydondagi energiyasi quyidagicha bo'ladi:

$$U = p' E \cos(p' E) . \quad (7)$$

Molekulaning dipol momenti maydon tomonidan induksiyalanganligi uchun uning yo'nalishiga mos tushadi, natijada $\cos(r'E)=1$ bo'ladi. Bu hosil bo'lgan maydon kattaligining o'zgarish chegarasi 0 dan E gacha bo'ladi. Natijada oriyentasion ta'sir energiyasi quyidagicha hisoblanadi:

$$U_{op} = - \int_0^E p' dE = - \int_0^E \alpha E dE = - \alpha \frac{E^2}{2} \quad (8)$$

$$U_{op} = - \alpha \frac{E^2}{2} \quad (9)$$



Endi o'z yo'nalishi bo'yicha dipolni hosil qilgan maydon kuchlanganligi

hisoblaymiz:

$$E = \frac{e}{r^2} - \frac{e}{(r+l)^2} \quad \text{yoki} \quad (10)$$

$$E = \frac{e}{r^2} - \frac{e}{r^2 + 2rl} = \frac{2pr}{r^4 + 2r^3l} \quad (11)$$

kichik miqdori bo'lganligi uchun (11) dagi $2r^3l$ ni hisobga olmasak ham bo'ladi, natijada:

$$E = \frac{2pr}{r^4} = \frac{2p}{r^3} \quad (12)$$

Oriyentasion qutblanuvchanlik kattaligi

$$\alpha = p^2 / 3kT \quad (13)$$

u holda oriyentasion ta'sir energiyasining ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$U_{op} = -\alpha \frac{E^2}{2} = -\frac{p^2}{3kT} \frac{(2p/r^3)^2}{2} = -\frac{p^2}{3kT} \cdot \frac{4p^2}{2r^6} = -\frac{2p^4}{3kTr^6}; \quad (14)$$

$$U_{op} = -\frac{2p^4}{3kTr^6} \quad (15)$$

Agar o'zaro ta'sir etuvchi molekulalarning energiyasi har xil bo'lsa, uning oriyentasion energiyasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

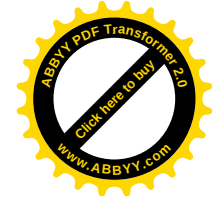
$$U_{op} = -\frac{2}{3} \frac{p_1^2 p_2^2}{kTr^6} \quad (16)$$

Energiyaning manfiy ishorasi ikkita dipolning tortishishini ko'rsatadi [2].

Induksion ta'sir. Har bir dipol qo'shni molekulada o'z yo'nalishiga mos bo'lgan dipolni induksiylaydi. Induksiyllovchi molekulaning qutblanuvchanligi α qancha katta bo'lsa, induksiylangan dipol momenti ham shuncha katta bo'ladi. Endi doimiy dipol momentiga ega bo'lgan va induksiya natijasida hosil bo'lgan dipol momentlari o'rtasidagi o'zaro tortishish energiyasini aniqlaymiz. Bizga ma'lumki,

$$U_{op} = -\alpha \frac{E^2}{2} \quad (17)$$

Xuddi shuningdek,



$$U_{ind} = -\alpha_{ind} \frac{E^2}{2} - \alpha_{ind} \frac{(2p/r^3)^2}{2} = -\alpha_{ind} \frac{4p^2}{2r^6} \quad (18)$$

$$U_{ind} = -\alpha_{ind} \frac{2p^2}{r^6} \quad (19)$$

Induksion ta'sir birinchi marta Debay tomonidan hisoblangan edi. Shuning uchun ham ba'zan bu ta'sirga Debaycha ta'sir ham deyiladi. Induksion ta'sir, oriyentasion ta'sirdan farqli o'laroq, temperaturaga bog'liq emas.

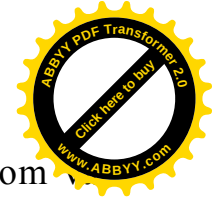
Dispersion ta'sir. Doimiy dipol momentiga ega bo'lmagan molekulalarning o'zaro ta'sirini hisoblash biroz boshqacharoq.. Bunday molekulalar ham o'zaro tortishish xususiyatiga egadirlar, chunki bu xususiyat bo'lmaganda temperaturani pasaytirib, bosimni oshirib gazlarni suyuqlikka aylantirib bo'lmas edi. Misol: havo bir necha simmetrik molekulalar N_2 , O_2 , CO_2 , Ar larning aralashmasidan iborat. Dipolsiz atom yoki molekulalarning o'zaro ta'sirini faqat kvant mexanikasi asosida tushuntirish mumkin. Londonning ko'rsatishicha, bu ta'sir molekulaning nolinchi energiyaga ega ekanligi bilan bog'lik.

Ma'lumki, $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$; $k = m\omega_0^2$ dan $\alpha = e^2 / m\omega_0^2$.

$$U_d = -\frac{h}{4\pi} \frac{\alpha^2 \omega_0}{r^6} = -\frac{\alpha^2}{r^6} \frac{h\nu}{2} \quad (20)$$

Bundan ko'rinadiki, 2 ta bir xil qutblanuvchanlikka ega bo'lgan ossillyatorning o'zaro ta'sir energiyasi qutblanuvchanlikning kvadratiga, izolyasiya qilingan alohida nolinchi energiyasiga, ya'ni $h\nu/2$ ga to'g'ri proporsional bo'lib, masofaning 6 chi darajasiga teskari proporsionaldir. (20) dan ko'rinadiki, molekulaning o'zaro tortishishiga sabab nolinchi energiyaning kamayishi, ya'ni kvantomexanik effektdir. Aniq nazariya dispersion ta'sir energiyasi uchun quyidagi natijani beradi:

$$U_d = -\frac{3}{4} \frac{I\alpha^2}{r^6}, \quad (21)$$



bu yerda I - atom yoki molekulaning ionizatsiya energiyasi. Agar 2 ta atom yoki molekulalar o'zaro ta'sirda bo'lsa, u holda (21) formulani quyidagicha yozish mumkin:

$$U_d = \frac{3}{2} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r_0^6} \quad (22)$$

Uchala U_{op} , U_{ind} , U_d kuchlarning yig'indisiga Van-der-Vaals kuchlari ham deyiladi. Shunday qilib, r_0 dipol momentiga va α qutblanuvchanlikka ega bo'lgan molekulaning o'zaro ta'sir energiyasi quyidagilarning yig'indisidan iborat bo'ladi:

$$U = U_{op} + U_{ind} + U_d = -\left(\frac{2}{3} p_0^4 \frac{1}{kT} + 2\alpha p_0^2 + \frac{3}{4} I \alpha^2\right) \frac{1}{r^6} \quad (23)$$

Agar dipol momenti uncha katta bo'lmasa, ta'sir energiyasi asosan dispersion energiyadan iborat bo'ladi.

Dispersion o'zaro ta'sirlar ko'pchilik jismlarni tashkil qiluvchi molekulalararo o'zaro ta'sirlarda katta rol o'ynaydi. Ular, shuningdek, gidrofobil qobiqlarni shakllantiradi. Gidrofobil bog'lanishlar hisobiga nukleotidlar radikal va oqsil strukturasida aminokislotalar radikallarini qutblanmagan uchastkalari, lipid qobiqlaridagi lipid radikallari tartibli joylashadi va ular molekula va butun organoidda noaniqlik xolatini yaratmaydilar. Kondensirlangan fazoda molekulalar spektroskopiyasining prinsipial jixati shuki umumiy holda o'rganilayotgan molekulaning faqat fizik-kimyoviy xossalari emas [4], balki yorug'lik to'lqinining maydon kuchlanganligi kondensirlangan muhitda ta'sirlashishi va energetik sathlar o'rtasidagi shartli o'tishlar holati hisoblanadi.

1.2 §. Yorug'likning kombinatsion sochilishi

Yorug'lik maydoni ta'sirida tebranayotgan elektronlarning majburiy tebranishlari tufayli paydo bo'ladigan ikkilamchi to'lqinlar yorug'lik to'lqini olib kelayotgan energiyaning bir qismini chetga sochib yuboradi. Boshqacha qilib aytganda moddadan yorug'lik tarqalayotganda yorug'lik sochilishi kerak. Bunday



hodisa yuz berishi uchun yorug'lik to'lqinining o'zgaruvchi maydoni ta'siri ostida tebrana oladigan elektronlarning bo'lishi etarlidir [5]. Reley sochilishida sochilgan yorug'lik chastotasi tushuvchi yorug'lik chastotasiga mos keladi. Sochilishning bunday turining birinchi bo'lib Reley aniqlagani uchun bunday sochilish **Reley** sochilish deb yuritiladi. Bu sochilish kogerent tarzda yuz beradi. Shu sababli ham **Reley** sochilishi-yorug'likning kogerent sochilishidir (1-rasm, a). Biroq sinchiklab o'tkazilgan tekshirishning ko'rsatishicha, sochilgan yorug'lik spektrida tushayotgan yorug'likni xarakterlaydigan chiziqlardan tashqari qo'shimcha chiziqlar (yo'ldoshlar) borligi, bular tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida turishi ma'lum bo'ldi (1-rasm).

Yo'ldoshlar tushayotgan yorug'likning har qanday spektral chizig'i yonida kelgani uchun, bu yo'ldoshlarni qanday sharoitda payqash mumkin, degan savol tug'iladi. Yo'ldoshlar ko'rinadigan bo'lishi uchun tushayotgan yorug'lik spektri tutash spektr bo'lmay, balki alohida chiziqlar (monoxromatik chiziqlar) to'plamidan iborat bo'lishi kerak. Bu hodisaning quyidagi qonunlari tajribadan topilgan [5-10].

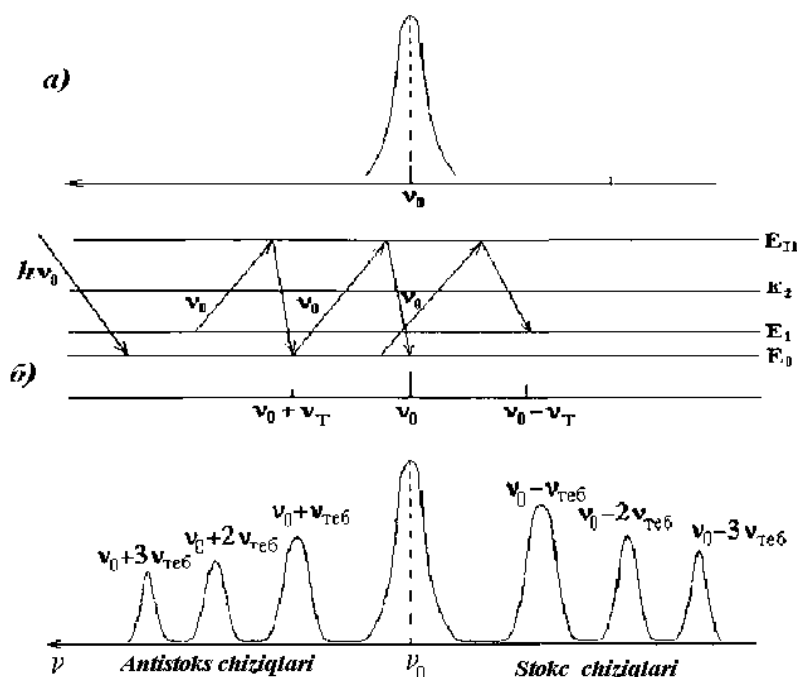
1) Yo'ldoshlar tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida bo'ladi.

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

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

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

$$\nu_0 - \nu_r = \nu_v - \nu_0.$$



1-rasm. Uygʻotuvchi manbaning (a) va kombinatsion sochilish spektrining (b) sxematik koʻrinishi. ($E_0, E_1, \dots$ energetik holatlar)

Bu yerda ν_r chastota uygʻotuvchi chastotalardan uzunroq toʻlqinli tomonda joylashgan yoʻldoshlarning chastotalarini, ν_0 chastota esa uygʻotuvchi chastotalardan ikkinchi tomonda yotgan yoʻldoshlarning chastotalarini bildiradi. Spektrning qizil qismiga yaqin joylashgan va shuning uchun «qizil» yoʻldoshlar deb ataladigan birinchi yoʻldoshlar «binafsha» yoʻldoshlardan ancha intensivdir (1-rasm).

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

Kombinatsion sochilishni birinchi boʻlib G.S.Landsberg va L.I. Mandelshtamlar hamda Hind olimlari Raman va Krishnanlar kashf etishgan. Hind olimlari Nobel mukofotiga sazovor boʻlishgan [9,10].

Yorugʻlikni kombinatsion sochilishining mumtoz nazariyasi. Kombinasion sochilish hodisasi klassik nazariya nuqtai nazaridan quyidagicha tushuntiriladi. Ushbu hodisada yoʻldoshlarning paydo boʻlish sabablari yorugʻlik toʻlqinini sochuvchi muhit molekulasi atomlarining past chastotali tebranishlari bilan modulyatsiyalanishi orqali tushuntirish mumkin. Molekulaning qutublanishi,



umuman qaraganda uni tashkil qilgan atomlarning joylashishiga bog'liq [5,6,7]. Atomlar tebranganda qutublanish α_0 - o'rtacha qiymat atrofida shu tebranishdini buni quyidagicha izohlash mumkin:

$$\alpha(t) = \alpha_0 + F(t) \quad (24)$$

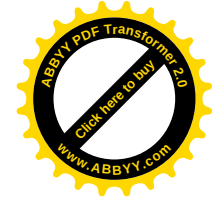
Ushbu tebranishlarning chastotasi 10^{12} - 10^{13} gs bo'lib, elektromagnit to'lqin shkalasining infraqizil spektri sohasiga to'g'ri keladi. Boshqacha aytganda, kattalikni o'zgarishi tushayotgan yorug'likning ($\approx 10^{15}$ Gs) elektr maydonning tebranishiga nisbatan sekinroq o'zgaradi. Shu sababga ko'ra ham tushayotgan yorug'lik to'lqining monoxromatik maydonida molekulaning dipol momentini o'zgarishi

$$p(t) = \alpha \cdot E = [\alpha_0 + F(t)]E_0 \cos \omega t \quad (25)$$

qonun bo'yicha ro'y beradi, ya'ni ampitudasi modulyatsiyalangan tebranishdan iborat bo'ladi. Bu yerda $E = E_0 \cos \omega t$ -yorug'lik to'lqinining o'zgaruvchan elektr maydoni, E_0 yorug'lik to'lqini elektr maydoni kuchlanganligini amplitudasi, $\omega = 2\pi\nu$ - tushayotgan yorug'likning burchak chastotasi, α - molekulaning qutublanuvchanligi, faqat uning tuzilishi va xossasiga bog'liq bo'lgan doimiy [5-6].

Bu jarayonda sochilgan yorug'lik maydon kuchlanganligining tebranishi ham modulyatsiyalanadi. Bu tebranishlarning eltuvchi chastotasi tushayotgan yorug'lik to'lqining chastotasi ω ga teng, modulyatsiya esa ω_i - chastotalarda (sochuvchi modda molekulasiidagi atomlarning tebranish chastotasi) yuz beradi. Amplitudasi modulyatsiyalangan bunday tebranishlarning spektri ω - chastotali eltuvchi chastota bilan bir qatorda $\omega \pm \omega_i$, chastotaga ega bo'lgan kombinatsion tebranishlar hosil bo'ladi. Boshqa so'z bilan aytganda sochilgan yorug'likning spektri shu molekula haqida axborot beradi. Bu spektrni o'rganish va taxlil etish orqali molekula strukturasini va tuzilishini bilishga muvaffaq bo'lamiz [9-10].

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



$$I_v = \frac{16\pi^4 v^4}{3c^2} \alpha^2 E_0^2 \quad (26)$$

ga teng bo'lgan monoxromatik nur chiqaradi.

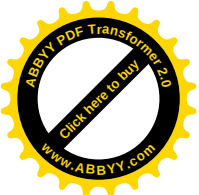
$\alpha \neq const$ hol uchun, ya'ni sochuvchi muhit molekulasining qutublanuvchanligi o'zgaruvchan bo'lsa u holda molekulaning dipol momenti ham vaqt bo'yicha o'zgaradi. Umuman, molekula qutublanuvchanligi yadro tebranishini dipol tebranishlarida ishtirok etishi sababi bilan ham o'zgarib turishi kerak.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

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

$$I_{s,A} = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_R^{S,A})^4 \alpha^4 E_0^2 = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_0 \mp \nu_i)^4 \alpha^4 E_0^2 \quad (27)$$

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

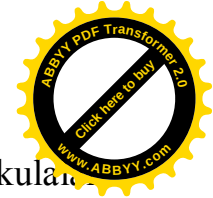
Mumtoz elektrodinamika nuqtai nazaridan stoks va antistoks chiziqlarining intensivligi teng ekanligi kelib chiqadi. Eksperiment natijalaridan yaxshi bilamizki, ushbu chiziqlarning (yo'ldoshlarning) intensivligi teng emas, jumladan qizil yo'ldoshlar-stoks chiziqlarining intensivligi binafscha yo'ldoshlarning intensivligidan yuqori ekanligini ko'rsatadi. Klassik fizika qizil va binafscha yo'ldoshlarning intensivliklari orasidagi ushbu miqdoriy farqni tushuntirib bera olmadi. Yorug'likning kombinatsion sochilishdagi intensivliklarning miqdoriy muammosini faqat kvant tasavvurlari asosida to'g'ri tushuntirish mumkin [6,9].



Yorug'likni kombinatsion sochilishini kvant nazariyasi. Yorug'lik

kvantlari to'g'risidagi soddalashtirilgan tasavvurdan foydalanib, kombinatsion sochilish hodisasining mohiyatini anglab yetish mumkin. Kvant asavvurlariga asosan, ν_0 chastotali yorug'lik ma'lum bir ulushlar (kvantlar) tarzida tarqalib, bularning miqdori $h\nu_0$ ga teng bu yerda $h=6,62\cdot 10^{-34}$ J·s - Plank taklif etgan universal doimiydir. Shuning uchun o'zida ν_0 chastotali tebranishlar bo'layotgan atom $h\nu_0$ energiya zahirasi ega bo'ladi. Bu energiyani atom o'shanday chastotali yorug'lik tarzida chiqarishi mumkin. Bu nuqtai nazardan yorug'likning molekulalarda sochilishini yorug'lik kvantlarining (ya'ni fotonlarning) molekulalar bilan to'qnashishi deb qarash mumkin, bu to'qnashish natijasida fotonlar uchish yo'nalishini o'zgartiradi, ya'ni chetga sochiladi. Fotonlar bilan molekulalar o'rtasidagi to'qnashishlar elastik bo'lishi ham, noelastik bo'lmashligi ham mumkin. To'qnashish elastik to'qnashish bo'lgan holda molekulaning energiyasi va fotonning ν_0 chastotasi o'zgarmaydi, bu hol Reley sochilishiga mos keladi (1-rasm). Releycha sochilish paytida sochilgan yorug'lik kvantlarining chastotasi muhitga tushayotgan yorug'lik kvantlarining chastotalariga mos keladi. Shuning uchun ham Releycha sochilishga **elastik** sochilish ham deyiladi [5-9].

To'qnashish elastik bo'lmagan holda fotonning energiyasi $h\nu_i$ tebranma kvant miqdorida ortadi yoki kamayadi. Agar yorug'lik tebranish holatida bo'lmagan molekula bilan o'zaro ta'sir qilishsa, yorug'lik molekulaga energiyasining tegishli qismini berib, $h\nu'=h\nu_0-h\nu_i$ yoki $\nu'=\nu_0-\nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda kichik chastotali nurga (qizil yo'ldosh, Stoks chizig'iga) aylanadi, bu yerda ν_0 o'yg'otuvchi yorug'lik chastotasi, ν_i molekula tebranishlarining chastotasi. Agar yorug'lik tebranish holatida turgan molekulaga, ya'ni $h\nu_i$ - energiyaga ega bo'lgan molekulaga ta'sir qilsa, u holda yorug'lik molekuladan bu energiyani tortib olib, $h\nu'=h\nu_0+h\nu_i$ yoki $\nu'=\nu_0+\nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda katta chastotali nurga (Binafsha yo'ldosh, antistoks chizig'iga) aylanadi. Buni 1-rasmdan osongina tushinish mumkin. Yuqorida aytilganlardan kelib chiqib kombinatsion sochilishga quydagicha ta'rif berish mumkin: Sochilgan



yorug'likning chastotasi tushayotgan yorug'likning chastotasi ν_0 bilan molekular

ichida bo'ladigan tebranishlar chastotasining ν_i kombinatsiyasidan tarkib topadi.

Shuning uchun bu sochilish kombinatsion sochilish deb ataladi [8-10].

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

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT_2}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT_1}}\right)} \quad (28)$$

Stoks chiziqlarining intensivligi temperaturaga teskari proporsional bo'lardi.

Antistoks chiziqlariniki esa temperaturaga to'g'ri proporsional bo'ladi:

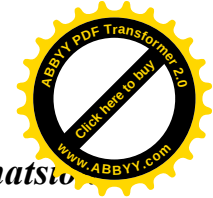
$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{e^{-\frac{h\nu}{KT_1}}}{e^{-\frac{h\nu}{KT_2}}} \quad (29)$$

Stoks va antistoks chiziqlarining intensivliklari nisbati

$$\frac{I_{ac}}{I_c} \approx \left(\frac{\nu_0 + \nu_{teb}}{\nu_0 - \nu_{teb}}\right)^4 \quad (30)$$

bundan ko'rinadiki chastotaning turtinchi darajasiga proporsional ekan.

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



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

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

1.3 §. Kombinasion sochilish spektrining intensivligi

Kombinasion sochilish spektri yordamida urganiladigan tebranma va aylanma sathlar orasidagi o'tishlar molekulaning qutblanishining o'zgarishi bilan bog'lik. Molekulaning qutblanganligi uning elektr maydoni ta'sirida qutblanish qobiliyatini aniqlaydi, ya'ni ma'lum bir yo'nalishdagi dipol momentini vujudga kelishini aniqlaydi. Yorug'likning moddadan sochilishi hamda bunday induksiyalangan moment tushayotgan yorug'lik ta'sirida, ya'ni elektromagnit to'lqin ta'sirida vujudga keladi [9]. Tushayotgan elektromagnit to'lqin elektr maydoni

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \cos 2\pi\nu_0 t \quad (31)$$

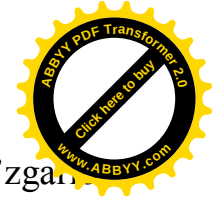
Atom va simmetriya markaziga ega bo'lgan molekulalar uchun induksiyalangan dipol momenti yo'nalishi maydon qutblanganligining yo'nalishi bilan mos tushadi va unga proporsional bo'ladi.

$$\mu = \alpha \vec{\varepsilon} \quad (32)$$

$$\alpha = \frac{\mu}{\varepsilon} = \frac{er}{e/r^2} = r^3 = (10^{-8})^3 = 10^{-24} \text{ cm}^3$$

α -sistemaning qutblanuvchanligi maydon kuchlanganligining yo'nalishiga bog'lik emas. Agar α -doimiy bulsa $\alpha = \alpha_0$ (α_0 -vaqtga bog'lik emas) (31) va (32) ga asosan

$$\mu = \alpha_0 \varepsilon_0 \cos 2\pi\nu_0 t \quad (33)$$



Shunday kilib, induksiyalangan dipol moment davriy ravishda o'zgarib turadi, uning o'zgarish chastotasi tushayotgan yorug'lik to'liqining chastotasiga teng [10]. Shunday qilib, biz garmonik tebranuvchi dipolga ega bo'lamiz va uning barcha yo'nalishlar bo'yicha nurlanish energiyasi

$$W_{\nu_0} = \frac{2}{3c^3} \left| \frac{d^2 \mu}{dt^2} \right|^2 = \frac{32\pi^4 \nu_0^4}{3c^3} |\alpha_0|^2 \varepsilon_0^2 \cos^2 2\pi \nu_0 t \quad (34)$$

bo'ladi. Biz o'zgarmas chastota va faza bilan sochilayotgan yorug'likni olamiz. Agar $W\nu_0$ energiyani vaqt bo'yicha o'rta qiymatini olsak.

$$\overline{W}_{\nu_0} = \frac{32\pi^4 \nu_0^4}{3c^3} |\alpha_0|^2 \varepsilon_0^2 \overline{\cos^2 2\pi \nu_0 t} = \frac{16\pi^4 \nu_0^4}{3c^3} |\alpha_0|^2 \varepsilon_0^2 \overline{\cos^2(\alpha + \beta)} = \frac{1}{2} \quad (35)$$

Bu ifoda alohida zarracha tomonidan sochilish intensivligini aniqlaydi va u tashayotgan yorug'lik to'liqini amplitudasining kvadratiga, chastotaning to'rtinchi darajasiga hamda qutblanuvchanlikning kvadratiga proporsional bo'ladi [11].

Elektromagnit to'liq nurlanishi energiyasining zichligi. $\rho(\nu) = \frac{\varepsilon_0^2}{8\pi}$ ekanligidan

$$\overline{W}_{\nu_0} = \frac{128\pi^5 \nu_0^4}{3c^3} |\alpha_0|^2 \rho(\nu_0) \quad (36)$$

Vaqt birligi ichida atom yoki molekula tomonidan sochilgan fotonlar soni

$$Z^{(P_{oc})} = \frac{W_{\nu_0}}{h\nu_0} = \frac{128\pi^5 \nu_0^3}{3hc^3} |\alpha_0|^2 \rho(\nu_0) \quad (37)$$

va nihoyat sochilish ehtimoliyati degan tushunchani kiritish mumkin.

$$C = \frac{1}{\rho(\nu_0)} \frac{W(\nu_0)}{h\nu_0} = \frac{128\pi^5 \nu_0^3}{3hc^3} |\alpha_0|^2 \quad (38)$$

Sochilish ehtimoliyati chastotaning kuchiga va qutblanuvchanlikning kvadratiga proporsional. Endi qutblanuvchanlik doimiy bo'lmagan holni qaraylik. Harakatlanayotgan molekula uchun α -qutblanuvchanlik davriy ravishda o'zgarib turadi.

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_v \cos 2\pi \nu t \quad (39)$$



ya'ni α_0 -doimiy qismdan tashqari α -qutblanuvchanlik. ν -chastota bilan davr, ravishda o'zgarib turuvchi qismga ham ega bo'ldi. U holda (33) o'rniga

$$\mu = \alpha_0 \varepsilon_0 \cos 2\pi\nu_0 t + \alpha_\nu \varepsilon_0 \cos 2\pi\nu t \cdot \cos 2\pi\nu_0 t \quad (40)$$

ni olamiz.

Bu ifodaning ikkinchi qismi amplitudasi ν -chastota bilan o'zga-rayotgan ν_0 -chastotani tebranishga mos keladi. $\nu \prec \nu_0$ amplituda modulyasiyasi ν_0 -tushayotgan yorug'lik to'lqinining chastotasi, ν esa molekuladagi atomlarning tebrani chastotasi. Molekuladagi atomlarning tebranish chastotasi IK oblastga to'g'ri keladi. Yorug'lik to'lqini esa ko'rinadigan oblastda, shuning uchun hamisha

$$\nu \prec \nu_0$$

$$\cos 2\pi\nu t \cos 2\pi\nu_0 t = \frac{1}{2} \cos 2\pi(\nu_0 - \nu)t + \frac{1}{2} \cos 2\pi(\nu_0 + \nu)t$$

ko'rinishda ifodalab

$$\mu = \alpha_0 \varepsilon_0 \cos 2\pi\nu_0 t + \frac{1}{2} \alpha_\nu \varepsilon_0 \cos 2\pi(\nu_0 - \nu)t + \frac{1}{2} \alpha_\nu \varepsilon_0 \cos 2\pi(\nu_0 + \nu)t \quad (41)$$

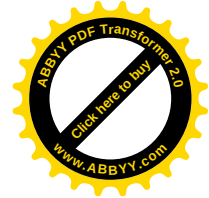
ya'ni induksiyalangan dipol momenti ν_0 chastotali μ_{ν_0} haddan tashqari $\nu_0 - \nu$ va $\nu_0 + \nu$ chastota bilan o'zgaradigan $\mu_{\nu_0 - \nu}$ va $\mu_{\nu_0 + \nu}$ hadlarda ham ega bo'ladi. Bu hadlar $\nu' = \nu_0 - \nu \prec \nu_0$ (stoks chiziqlari), $\nu'' = \nu_0 + \nu \succ \nu_0$ (antistoks chiziqlari) chastotali kombinasion sochilishni ifodalaydi [11]. Kombinasion sochilishning intenchisligi (35) dagidek

$$\overline{W}_{\nu_0 - \nu} = \frac{4\pi^4(\nu_0 - \nu)^4}{3c^2} |\alpha_\nu|^2 \varepsilon_0^2 \quad (42)$$

stoks chizig'i uchun

$$\overline{W}_{\nu_0 + \nu} = \frac{4\pi^4(\nu_0 + \nu)^4}{3c^3} |\alpha_\nu|^2 \varepsilon_0^2 \quad (43)$$

antistoks chizig'i uchun. Kombinasion sochilishning kvant nazariyasiga asosan $\nu_0 - \nu$ stoks chizig'i E_k pastki energetik sathdan E_i yuqorigi energetik sathi o'tishlarga mos keladi. $\nu_0 + \nu$ esa E_i dan E_k ga o'tishga mos keladi.



$$h\nu = h\nu_{ik} = E_i - E_k \quad E_i \succ E_k$$

Bu degan so'z stoks sochilishda modelga tushayotgan foton energiyasining bir qismini sochuvchi moddaga beradi va kichik chastota bilan sochiladi.

$$E_k - E_i = h\nu_{cuq} = h\nu_{nod} - h\nu$$

va teskarisi

Agar (42) va (43)-ifodalarda qutblanuvchanlik α_ν ning o'rniga kombinasiyalanuvchi sathlarni xarakterlovchi $2\alpha_{ki}$ va $2\alpha_{ik}$ larni qo'ysak (α_{ki}, α_{ik} - o'tish qutblanuvchanligi) u holda

$$\left. \begin{aligned} \overline{W}_{\nu_0 - \nu} &= \frac{16\pi^4 (\nu_0 - \nu)^4}{3c^3} |\alpha_{ki}|^2 \varepsilon_0^2 \\ \overline{W}_{\nu_0 + \nu} &= \frac{16\pi^4 (\nu_0 + \nu)^4}{3c^3} |\alpha_{ik}|^2 \varepsilon_0^2 \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

μ_{ki} va μ_{ik} lar yutilish spektrining intensivligini belgilagani kabi α_{ki} va α_{ik} o'tish qutblanuvchanliklari kombinasion sochilish chiziqlarining intensivliklarini belgilaydi.

$$\left. \begin{aligned} \overline{W}_{\nu_0 - \nu} &= \frac{16\pi^4 (\nu_0 - \nu)^4}{3c^3} \varepsilon_0^2 \frac{1}{g_k} \sum_{\delta\varepsilon} |\alpha_{i\delta, k\varepsilon}|^2 \\ \overline{W}_{\nu_0 + \nu} &= \frac{16\pi^4 (\nu_0 + \nu)^4}{3c^3} \varepsilon_0^2 \frac{1}{g_i} \sum_{\delta\varepsilon} |\alpha_{i\delta, k\varepsilon}|^2 \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Modda termodinamik muvozanatda bo'lganda ya'ni energetik sathlar bo'yicha zarrachalarning taqsimlanishi Maksvell Bolsman qoidasiga bo'linganda bu taqsimlanishlar nisbati

$$\frac{n_i}{n_k} = \frac{g_i}{g_k} e^{-\frac{E_i - E_k}{kT}} = \frac{g_i}{g_k} e^{-\frac{h\nu_k}{kT}} \quad (46)$$

bo'lganda ko'rsatish mumkinki antistoks chizig'i intensivligining stoks chizig'i intensivligiga nisbati

$$\frac{I_{antuc}}{I_{stok}} = \frac{U_{ik}^{(cuq)}}{U_{ki}^{(cuq)}} = \frac{(\nu_0 + \nu_{ik})^4}{(\nu_0 - \nu_{ik})^4} e^{-\frac{h\nu_{ik}}{kT}} \quad (47)$$



$\nu_{ik} \ll \nu_0$ bo'lganligi uchun $h\nu_{ik} \gg kT$ bo'lganda bu nisbat kichik bo'ladi. $h\nu_{ik} \ll kT$ bo'lganda esa bu nisbat 1 ga yaqin bo'ladi.

Yuqorida aytinganidek qutblanuvchanlik tenzor kattalikdir va bu tenzor 6 ta tashkil etuvchidan iborat [9]. Kombinasion sochilishda har bir $E_k \rightarrow E_i$ o'tishlarda ana shu 6 ta miqdorning yig'indisi bilan xarakterlanadi.

$$(\alpha_{xx})_{ki}, (\alpha_{yy})_{ki}, (\alpha_{zz})_{ki}, (\alpha_{xy})_{ki}, (\alpha_{yz})_{ki}, (\alpha_{zx})_{ki}$$

kombinasion sochilishda o'tishlar bo'lishi uchun mana shu kattaliklardan birortasi noldan farqli bo'lishi shart.

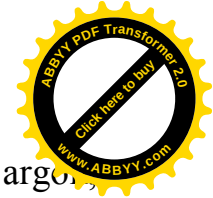
Qutblanuvchanlik tenzori $\alpha_{\lambda\mu}$ ning ko'zg'almas sistemadagi tashkil etuvchisi molekulaning aylanma harakati paytida davriy o'zgarib turadi. Shuning uchun agar molekulaning aylanma harakati paytida qutblanuvchanlik tenzorining 6 ta qiymatidan birortasi noldan farqli bo'lsa u holda kombinasion sochilishda bu harakatga tegishli o'tishlar aktiv bo'ladi.

Shunday qilib biz infraqizil yutilish (IK) spektrida molekulaning biror tur harakatiga tegishli o'tishlarni ko'rishimiz uchun molekulaning dipol momenti davriy o'zgarishi kerak kombinasion sochilish (KS) spektrida kuzatishimiz uchun qutblanuvchanlik tenzori davriy ravishda o'zgarishi kerak [10].

Xulosa qilib aytish mumkinki, IK yutilish spektrida taqiqlangan o'tishlar KS spektrida kuzatiladi. KS spektrida taqiqlangan o'tishlar IK yutilish spektrida kuzatiladi. Bu hodisa alternativ taqiq deyiladi.

1.4 § Noempirik hisoblashlarda molekulalarning elektron tuzilishini hisoblash usullari

Hozirgi zamon tushunchasida molekula moddaning barcha ximiyaviy xossalarini o'zida jamlagan eng kichik zarrasi. Molekula mustaqil mavjud bo'la olish xususiyatiga ega. U bir xil atomlardan, kislorod O₂, ozon O₃, azot N₂, fosfor R₄, oltingugurt S₆ va h. k. dan hamda turli atomlardan tashkil topishi mumkin: bular jumlasiga barcha murakkab moddalar kiradi. Eng sodda molekulalar bitta



atomdan tashkil topgan: bo'lar inert gazlar molekulari - geliy, neon, argon, kripton, ksenon, radondir. Yuqori molekulyar birikmalar va polimerlarda har bir molekula yuz minglab atomdan tashkil topishi mumkin.

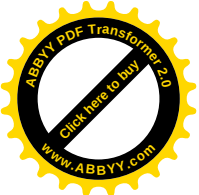
Fransuz fizigi J.Perren 1906 yilda Broun harakatini o'rganayotganda, birinchi bo'lib, molekularning mavjudligini eng ishonchli tarzda eksperimental isbot qilib berdi. Perrenning ko'rsatishicha, broun harakati, molekularning issiqlik harakatidan boshqa narsa emas [11].

Molekulaning mohiyatini boshqa nuqtai nazardan ham tavsiflash mumkin: molekula-atomlarning (bir xil yoki har xil) yadrolaridan va ularni qurshagan elektronlardan tashkil topgan turg'un sistema. Molekulaning ximiyaviy xossalari atomlardagi tashqi qobiq elektronlari bilan belgilanadi. Ko'pgina hollarda atomlar ximiyaviy bog'lanishlar vositasida molekular tarzida uyushadi. Odatda, bunday bog'lanishni ikkita atom birgalikda ega bo'lgan bitta, ikkita yoki uchta juft elektronlar vujudga keltiradi [11].

Molekulalarda atomlar bir-biri bilan muayyan ketma-ketlikda bog'langan va fazoda muayyan tarzda taqsimlangan. Atomlararo bog'lanishlar turli mustahkamlikka ega; u atomlararo bog'lanishni uzish uchun sarflash zarur bo'lgan energiya kattaligi bilan baholanadi.

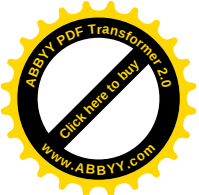
Bu kattalik turli xil bog'lanishlar uchun bir-biridan kuchli farq qilsa-da, bir necha o'n kkal/mol dan ortiq bo'lmaydi.

Molekulalar muayyan o'lcham va shakl bilan xarakterlanadi. Agar molekulyar og'irlik va ushbu modda zichligi ma'lum bo'lsa, u holda uning molekulari o'lchamini aniqlash qiyin emas. Buning uchun moddaning grammolekulasi egallaydigan hajmni Avogadro soniga bo'lish lozim. Olingan qiymatdan chiqarilgan kub ildiz bizga molekula diametri kattaligini beradi. Biroq bunday hisoblash usulini kamdan-kam hollardagina qo'llash mumkin; ko'pgina moddalar molekularining geometrik o'lchamlarini aniqlash uchun turli eksperimental o'lchash usullari ishlatiladi. Molekulaning shakli atomlararo bog'lanish uzunligi hamda bog'lanishlar orasidagi burchak orqali aniqlanadi. Masalan, suv molekulasida O - N bog'lanish uzunligi taxminan 0,96 Ani, bu ikkita

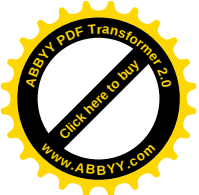


bog'lanish orasidagi burchak esa $104^{\circ}27'$ ni tashkil qiladi. O'z navbatida bog'lanishlar uzunliklari va burchaklar atomlar elektron qobiqlarining tuzilishiga va ularning bir-biriga ta'siriga bog'liqdir. Molekulalar uchburchak, piramida, tetraedr va boshqa geometrik shakllarga ega bo'lishi mumkin. Biroq molekulalarida atomlar chiziqli tarzda joylashgan moddalar ham keng tarqalgan. Molekulalarning tuzilishi rentgeno-, elektrono va neytronografiya yordamida, molekulyar spektroskopiya va boshqa metodlar vositasida o'rganiladi [12].

Gazsimon holatda moddalar, ko'pincha, odatdagi temperaturalarda molekulalardan iborat bo'ladi; bir muncha kuchliroq qizdirilganda ularning atomlarga termik dissotsiatsiyasi sodir bo'ladi. Ko'pgina suyuqliklar va molekulyar kristallar uchun molekulalarning mavjudligi xarakterlidir. Barcha eslangan moddalar uchun ximiyaviy formulalar bevosita molekulalarning miqdoriy va sifatiy tarkibini ifodalaydi. Hozirgi zamon nuqtai nazaridan, metallar, qotishmalar, shuningdek ion va atom kristallarda molekulalar mavjud bo'lmaydi. Buning boisi shuki, bunday moddalarda har bir atom (ion) barcha qo'shni atomlar (ionlar) bilan taxminan birday o'zaro ta'sirlashadi. Molekulaning muayyan shakl va tuzilishiga ega bo'lishi undagi atomlarning qat'iy bir tartibda joylashishini ko'rsatadi. Boshqacha aytganda, molekulalardagi valentliklar barcha tomongan bir xil yo'nalgan emas, balki muayyan yo'nalishlarda "mahkamlangan", kovalent bog' yo'nalishiga ega deymiz. Kovalent bog' shu jihatdan ham ion bog'dan farq qiladi. Ion bog' yo'nalishga ega emas. Chunki ion bog' ikkita qarama – qarshi zaryadning elektrostatik tortishib turishidan vujudga keladi. Bu zaryadlar izotrop (hamma yo'nalishlarda bir xil) dir. Ko'p elektronli sistemalar (molekulalar) da elektron zaryadlari bir tekis va sferik simmetrik taqsimlanmagan. Bu – molekulalardagi ximiyaviy bog'larni hosil qiladigan kuchlar ion bog'lardagi kabi hamma tomonga bir xilda yo'nalmaganligini ko'rsatadi. Kovalent bog'ning bu xususiyati shu bog'ni vujudga keltiradigan elektron bulutlarning fazoda yo'nalishiga ega bo'lishidan kelib chiqadi. Elektron bulutlarning fazoviy yo'nalishga ega bo'lishining sababi nimada? Ikkinchi davr elementlaridan azot va kislorodning tashqi qavatidagi elektronlar muvofiq ravishda 5 va 6 ta. Shundan azot atomida ikkita elektron



juftlashganu, lekin umumlashmagan [13]. Kilorodda esa, ikkita umumlashmagan elektron jufti bor. Ma'lumki, elementning sirtqi qavatida nechta toq spinli elektroni bo'lsa, u bog' hosil qilishda shu elektronlari va ular joylashgan orbitallari bilan ishtirok etadi [12]. Azot atomi va vodorod atomlaridan ammiak hosil bo'lishida azot atomining p - orbitallari vodorodning $1s$ – orbitallari bilan qoplanadi. $1s$ – orbitallar sharsimon bo'lganidan p - orbitallar bilan qoplanganida, ularning fazodagi o'rni p - orbitallarning joylashishiga bog'liq. Uchta p - orbitalni fazoda x , y , z o'qlari bo'ylab joylashtirish mumkin. Koordinata markazi azot atomiga muvofiq keladi. Koordinata markazidan turib turgan holda o'qlar yo'nalishlarini pastga qaratilsa B ga o'xshagan shakl, uch burchakli piramida hosil bo'ladi. p - orbitallarning ikkinchi yarmi ham xuddi shunday piramida hosil qiladi. Endi vodorod atomlarining $1s$ – orbitallarining uchta p - orbital bilan qoplangan holati (V) ni olib ko'raylik. ($1s$ – orbitallar gantellarning pastki pallalari bilan qoplanadimi yoki yuqoridagilari bilan qoplanadimi, buning ahamiyati yo'q. Har ikkala qoplanish bir xil natijaga olib keladi. Sxemada pallalarning pastki qismi bilan qoplanish ko'rsatilgan) [12-13]. Uchta qoplanish joyining har birida ikkitadan, jami oltita elektron bo'ladi. Elektronlarning uchtasini uchta vodorod atomi, qolgan uchtasini azot atomi berganligi tufayli uchta juft azot va vodorod atomlari uchun umumiydir. x , y , z koordinata o'qlari bir – biriga perpendikulyar, ular orasidagi burchak esa 90° . u holda azot atomidan piramidaning asoslari tomon yo'nalgan chiziqlar – azot atomining valentliklari orasidagi burchak ham shunga teng bo'ladi. Odatda bu hol azot atomining valentliklari piramida uchidan uning asoslari tomon yo'nalgan deyiladi. Demak, ammiak molekulasida uch burchakli piramida tuzilishiga ega bo'lishi, N – H bog'lar o'rtasidagi burchak 90° ga teng bo'lishi kerak. p - orbitallarning x , y , z o'qlari bo'ylab joylashishi sababi sxema V dan ko'rinib turibdi: qoplanish joyidagi elektron juftlar bir – biridan qochadi. Ana shunday joylashgandagina ular orasidagi masofa eng uzoq va o'zaro itarilish kuchlari minimal bo'ladi. Shunday qilib, p - orbitallarni fazoda muayyan tartibda joylashishga majbur qiladigan omil ular boshqa biror orbital (misolimizda $1s$) bilan qoplanganida, qoplanish joyida mavjud elektron juftlarning bir – biridan qochishi



hamda molekulaning bu itarilishni minimumga keltirishga intilishdir. Shunga o'xshash mulohazalar asosida, kislorodning ikkita p va vodorod atomlarining ikkita $1s$ – orbitallari qoplanib, suv molekulasida hosil qilishida ham p - orbitallar x , y , z o'qlari bo'ylab joylashishini, ularning ikkitasi vodorodning $1s$ – orbitallari bilan qoplanishini, qoplash joyida ikkita elektron juft bo'lishini, elektronlarning ikkitasi kislorodning toq elektronlari, yana ikkitasi vodorodga tegishli elektronlar ekanligini, uchinchi p -orbitalda kislorodning umumlashmagan jufti joylashishini isbot qilish mumkin. O-N bog'lar o'rtasidagi burchak 90° ga teng bo'lishi tushunarli [12].

Demak, suv molekulasida burchakli (yassi) tuzilishli bo'lishi kerak. Lekin spektral ma'lumotlar va boshqa tadqiqotlar ammiak va suv molekularining tetraedrik tuzilganligini, ammiakdagi N-N, suvdagi O-N bog'lar o'rtasidagi valent burchaklar muvofiq ravishda $107,3$ hamda $104,5^\circ$ ga tengligini ko'rsatadi.

Molekulalarning hajmlari to'g'risidagi dastlabki ma'lumotlar kinetik nazariya asosida olingan bo'lib, bu nazariyaga binoan molekulalar elastic shartlar deb qabul qilinadi. Kinetik energiyaga binoan molekulalar to'qnashish vaqtida o'zaro yaqinlashib keladigan eng kichik masofa ularning diametrlari deb qabul qilinadi. Effektiv radiusni kinetik nazariyasiga binoan topish uchun $v(\text{shar}) = 4\pi r_0^3$ formuladan foydalanamiz. O'zaro to'qnashayotgan ikkita sfera uchun hajmi $2V$ (shar) gat eng bo'ladi.

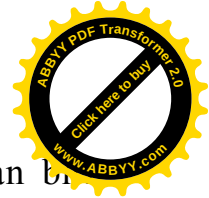
$$2V = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r_0^3 = 2V_0 \quad \text{Vander - Baals tenglamasiga binoan } v = n N_A V_0 \text{ edi.}$$

Bundan

$$V_0 = \frac{V_K}{3} \cdot \frac{V_K}{12 N_A}; \quad \text{Kritik xolat uchun } V_K = 3v; \quad v = \frac{V_K}{3}$$

Demak,

$$V_0 \frac{V_K}{3} \cdot \frac{1}{4 N_A} = \frac{V_K}{12 N_A}; \quad \frac{4}{3} \pi r_0^3 = \frac{V_K}{12 N_A}$$
$$R_0^3 = \frac{Bk}{16 P N_A}; \quad r_0 = \frac{PK}{16 \pi N_A} \quad r_0 = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{V_K}{2 \pi N_A}}$$



Demak, r_0 ni topish uchun real moddalarning kritik parametrlaridan birlashtirilgan kritik hajmni topish kifoy.

Bundan tashqari gaz holdagi modda molekulalarining ozod yo'l uzunligi

$$e = \frac{1}{\sqrt{2 N_1 \pi d^2}}$$

Formulasidan ham foydalanish mumkin. Bu yerda N_1 – hajm birligidagi molekulalar soni πd^2 – molekulani o'rab turgan va boshqa molekulalar kirolmaydigan sharning kesmasining yuzasi; d – molekulaning diametri.

Gazning yopishqoqligini $\eta = \frac{N_1 m W}{3}$ ga teng.

W – gaz molekulalarining o'rtacha tezligi, birinchi formulaga η ning qiymatini qo'yib n -ni 2 ta gaz uchun yozsak

$$\eta = \frac{N_1 m W \sqrt{2 N_1 \pi d^2}}{3} \quad \eta_1 = \frac{N_1^2 m_1 W_1 \sqrt{2 \pi d_1^2}}{3}$$

$$\eta_2 = \frac{N_2^2 m_2 W_2 \sqrt{2 \pi d_2^2}}{3}$$

$$n_2 - \text{ni } n_1 \text{ ga nisbatini topsak} \quad \frac{\eta_2}{\eta_1} = \frac{m_2 W_2 d_2^2}{m_1 W_1 d_1^2}$$

Agar birinchi gal sifatida biror etalon gaz (N_2, Ar, Kr) olinsa va $m = M/N_A$ dan topilishini e'tiborga olib

$$d_2^2 = \frac{\eta_2 \cdot m_1 W_1^2}{\eta_1 \cdot m_2 W_2^2} \text{ bo'yicha tekshirilayotgan gaz molekulasi} \text{ning kinetic}$$

diametric topiladi. Bu yerda n_1, n_2, W_1, W_2 va a_1 lar tajriba asosida topiladi.

Kimyoviy bog'larning uzunligi renttsi nurlari va elektron oqimlarining ularning to'liqsimon tabiati tufayli diffraksiyalanishiga asoslashgan. Bunday tajribalarda Bulf –Breg formulasidan foydalaniladi: Kvant mexanika kimyoviy kuch (valentlik) yo'nalishga ega ekanligini ko'rsatdi. Bu narsa valent elektronlar egallab turgan atom orbitallarning hiliga bog'liq.

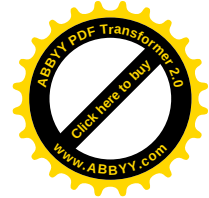
AO: s bog'lanishda tanlangan yo'nalishi yo'q.



p	bog`lanishlar	90^0	burchak	ostida	yo`nalish
sp	"	180^0	"	"	"
sp^2	"	120^0	"	"	"
sp^3	"	$109^020`$	"	"	"
sp^2d	"	90^0	"	"	"
sp^3d^2	"	90^0	"	"	"

Molekulalar o`z geometrik tuzilishiga qarab sferik (s), to`g`ri burchakli (p), chiziqlar (sp), planar ( $sp^2$ ), teatdaedri ( $sp^3$ ), planar kvadratik ( $sp^2d$ ), oktaekdrik ( $sp^3d^2$ ) bo`lishi mumkin. Boshqacha holler ham bo`lishi mumkin.

Bog` hosil qiluvchi elektronlarning qanday AO larni turganligiga qarab molekulalar turli fazoviy tuzilishga ega bo`ladi. Bunday masalalarni stersoximiya o`rganadi. Juft bog`lar bilan bog`langan uglerod atomlari asitilen kabi chiziqli yoki etilen kabi planar molekulalarni hosil qiladi. Benzol va naftalin molekulalari ham planardir, chunki ularda  $sp^2$  xilidagi gibridlanish mavjud. Bunday fazoviy tuzilish o`z navbatida aromatiklikni ta'minlaydi. n – bog`larini hosil qiluvchi va 2p orbitallarda joylashgan  $r$  – elektronlar o`zaro to`la –to`kis qoplanadi. Bunday qoplanishning butun xalqa bo`yicha ro`y berishi aynan aromatiklikni belgilaydi. Siklooktatetrayenda n -bog`lari o`zaro fazoda joylashganligi uchun ular qoplasha olmaydi. Aromatiklik ro`yobga chiqaolmaydi. Sikloalkanlarda "vanna" va "kreslo"-konformatsiyalarining paydo bo`lishi ham bu konformatsiyalar osonlik bilan bir –biriga o`tib turadi. Ammo potensial to`siqning qiymati katta bo`lsa, molekulalarning kinetic energiya zapasi uni yengib o`tishga yetmaydi va konformatsiyalar o`zaro barqaror bo`ladi.



II BOB. TAJRIBA QURILMASI TAVSIFI

2.1 § DFS-52 spektrometrning tuzilishi va ishlash prinsipi

DFS-52 spektrometrli lazerlar manbai yordamida yoritilgan suyuq kristall, polikristall moddalardan kombinatsion sochilish spektrini olish va qayd qilish uchun mo'ljallangan. Shuningdek bu spektrometr molekulyar spektroskopiya oblastida fizik-kimyoviy tekshirishlar, ya'ni suyuqliklar, (loyqa) suv aralashmalari, kristallar, plyonkalar va kraskalarining tarkibi hamda tuzilishini o'rganishda ishlatish mumkin [14-16].

Spektrometrning tuzilishi

Spektrometrning tarkibiga almashtiriluvchi difraksion panjaralari qo'shaloq monoxramator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi, chastotametr va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluvchi qurilma. ERU-53 termoelektrik sovutgichning ta'minlash manbai, alfavit-raqamli displey va yozuvchi qurilma (programmani tayyorlash sistemasi-15 IPG 32-003 ga kiruvchi). Laboratoriya o'zi yozuvchi asbobi LKS4-003, ulash kabellari va o'tkazgichlar jamlanmasi, almashtirish va ehtiyot qismlari kiradi [16].

Ishlash prinsipi

Tekshirilayotgan namunani monoxromatik yorug'lik bilan nurlantirilganda sochilgan yorug'likning spektrida qo'shimcha chiziqlar (kombinatsion sochilish chiziqlari) kuzatiladi. Bu chiziqlarni chastotalari namunaviy tushayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasining kombinatsiyasidan iborat bo'ladi. Kombinatsion sochilish spektrlarining intensivligi kichik bo'lib, ularni qayd qilish uchun yorug'likni kam sochuvchi monoxramatorlardan foydalanish zarur. Shuningdek, shovqinni ham yetarlicha stabil bo'lgan qayd qilishning sezgir sistemalaridan foydalanish kerak. DFS-52 spektrometrda uyg'otuvchi manba sifatida He-Ne lazeri ishlatiladi [16].

Spektrni tekshirish uchun yorug'likning kam sochuvchi difraksion panjarali



qo'shaloq monoxramatordan foydalaniladi. Spekrni qayd qilish sovitib turiladi, fotoelektron ko'rsatkich yordamida amalga oshiriladi. Hisoblash qurilmasi spektrometrning ketma ketligiga va spektral diapazonining berilgan qismida signallarning ketma-ket qayd qilinishi, olingan natijalarning matematik qayta ishlanishini va natijalar qayd qiluvchi asbobga chiqarishni ta'minlaydi.

Optik sxemasi

Spektrometrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qo'shaloq monoxramator va qabul qiluvchi qurilma elementlaridan iborat.

Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishini ta'minlaydi, namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qo'shaloq monoxramatorning kirish tirqishiga yo'naltiradi.

Ikkilangan ko'zguli monoxramator almashtiruvchi difraksion panjaraga ega bo'lib, u uyg'otuvchidan 20 sm masofada 8 dan 25 sm^{-1}/mm gacha teskari chiziqli dispersiyani ta'minlaydi. Qabul qilish blokining qayd qilish kanaliga o'rnatilgan obyektiv fotoelektron ko'paytirgichni qabul qilish maydonida monoxramator qorachig'ining ta'sirini beradi. Qabul qilish bloki (taqqoslash kanalining) oldiga o'rnatilgan yorug'lik o'tkazgich unga lazer nurlanishining bir qismini uzatadi [16].

Qo'shaloq monoxramatorning optik sxemasi va ishlatilishi

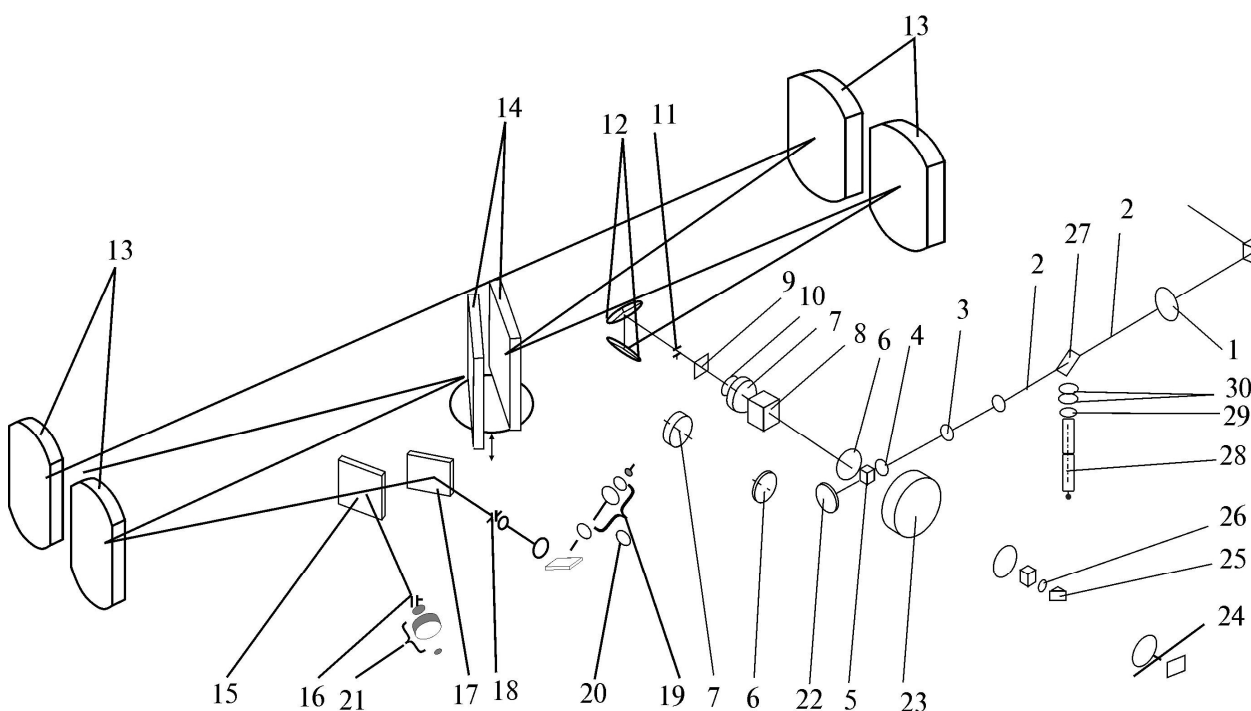
Yoritish sistemasi va qabul qilish bloki bo'lgan yorug'likning kombinatsion sochilishi uchun, spekrni olish va uni elektr signallariga aylantirish (sochilish spektrida energiyani taqsimlanishini harakterlovchi) uchun mo'ljallangan. Spektrometrning optik sxemasi 2-rasmda tasvirlangan. Yorug'lik manbaidan chiqqan lazerning parallel nurlar dastasi tor yo'l interfirension yorug'lik filteridan, diafragmadan 2, qutblanuvchi plastinkadan 3 ($\lambda/2$ yoki $\lambda/4$) va almashtiruvchi obektivlarini 4 biri orqali namuna 5 tekisligiga fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish asferik linza 6 lardan biri orqali proektsialovchi sistemada to'planadi va parallel dasta bo'lib obektivga 7 yo'naladi. Linza va obektiv 7 dan iborat proyeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qo'shaloq monoxramatorning kirish tirqishi oldida 2,3 yoki 3,5 marta kattalashtirib beradi.

Linza 6 bilan obyektiv 7 orasida parallel nurlar dastasiga prizma-analizator 8

qo'yilishi mumkin. Polyarizatsion tekshirishlar o'tkazganda monoxramatorning kirish tirqishi oldiga depolyarizatsiyalovchi klin 9 qo'yiladi. Yorug'lik filtri 10 spektrining 80 nm yuqori oblastida ishlaydi.

Kirish tirqishi 11 (qo'shaloq monoxramatorning) gorizontal joylashgan. Kirish tirqishining orqasiga 2 ta yassi buruvchi ko'zgudan iborat sistema 12 qo'yilgan. Bu sistema yorug'lik dastasini buradi.

Monoxramatorning obektivi 13 sifatida parabolasion ko'zgular 14 almashtirilishi mumkin. To'lqin uzunliklarining 400-600 nm diapazonida 1800 ta chizig'i bo'lgan panjaralar ishlatiladi. Chiqishdagi buruvchi ko'zgu 15 difraksiyalangan yorug'likni chiqish tirqishiga 16 yo'naltiradi. 15 ko'zguni yorug'lik dastasi olganda buruvchi ko'zgu (17 yorug'likning chiqish tirqishining imitatoriga) 18 yo'naltiradi. Bu esa spektrning oblastini okulyar 20 li tirqish trubasi orqali kuzatish mumkin. Qabul qiluvchi blokka o'rnatilgan obektiv 21 asbobning qorachig'ini fotoelektron ko'paytirgichining katodiga 1dan 20 kattalashtirishda akslantiriladi [16].



2-rasm. DFS-52 spektrometrining optik sxemasi

Lazerning yorug'lik dastasiga to'la foydalanish maqsadida yoritish sistemasida shaffof moddalar bilan ishlaganda sferik ko'zgu 22 qo'yiladi. Bu esa



lazer nurining moddadan qayta o'tishini ta'minlaydi. Ko'zga 23 yorug'lik dastanining namunada kuzatish yo'nalishiga qarama qarshi yo'nalishda sochilgan qismdan foydalanishini ta'minlaydi.

Shaffofmas namunalari bilan ishlash uchun buruvchi prizma 25 va qisqa fokusli linza 26 ishlatiladi. Bular lazer nurini kukun yoki suyuqlik uchun mo'ljallangan idishga proyeksiyalaydi.

Plastina 27 lazer nurining 1,5-2,01 ni yorug'lik o'tkazgichning 28 kirishiga uzatadi. Yorug'lik uzatgich orqali nurlanish taqqoslash kanalining qabul qiluvchisiga uzatiladi. Bunda yorug'lik oqimi intensivligini qo'pol regulirovkasi yorug'lik dastasidagi susaytiruvchi yorug'lik filteri 29 ni kiritish bilan amalga oshiriladi, aniq regulirovkasi esa 2 ta polyaroidlar 30 ni burish bilan amalga oshiriladi.

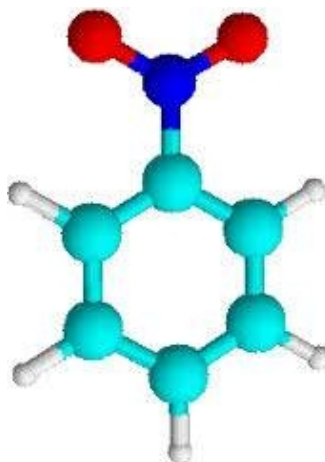
2.2 § Tadqiqot obyektni tanlash va moddalarni eksperimentga tayyorlash

Biz tadqiqot obekti sifatida nitrobenzol moddasini tanlab oldik. Nitrobenzol molekulasi molekulalararo vodorod bog'lanish bor bo'lgan sistemalarga kiradi. H-bog'lanish orqali har xil agregatsiyalar mavjud bo'lishi mumkin. Bu agregatsiyalarning (dimer, trimer va yanada yoqoriroq polimerlar) strukturasi kam o'rganilgan. Biz nitrobenzolning sof holatdagi va uning inert erituvchisi geksan bilan spektral namoyon bo'lishini o'rganib chiqdik.

Molekulalararo H-bog'lanishning hosil bo'lishi shunga olib keladiki shu tebranishga tegishli polosa katta chastotalar tomonda siljiydi va kuchli kengayad. Bu kengayishning sababi juda aniq emas. Molekulalararo H-bog'lanishning shu H-bog'lanishda ishtirok etmaydigan atomlarining tebranishlarida namoyon bo'lishi kam o'rganilgan. Bu polosalarning sturukturasini o'rganish katta ahamiyatga ega. Chunki polosalar formasi bo'yicha molekulalarning orentasion va tebranma relaksasiya vaqtlari aniqlanadi.

Tanlangan obektning kombinasion sochilish spektrlarining ba polosalarida sochilgan yorug'likning turli qutublangan polosalari maksimumlari chastotalari bir-biriga mos tushmadi. Bu hodisaning sababi ham hali uncha aniq emas. Lekin bir nechta obstrakt g'oyalar ishlab chiqildi. Yuqorida sanab o'tilgan muammolar sababli nitrobenzol va ularning eritmalarining kombinasion sochilish spektrlarini batafsil o'rganish zarur va bunday tadqiqotlar yuqoridagi muammolarni yechishga yordam beradi.

Nitrobenzol moddasi rangsiz, yalpi yog'li suyuqlik, molekulyar og'irligi: 123,12 B a.e.m. , erish nuqtasi: 5,76 °C, Qaynash tempraturasi: 210,9 °C, ravshanligi (g / 100 g yoki xarakterli) benzoldagi: geksaonda osonlik bilan eriydi: 0.19 (20 ° C). Nitrobenzolning kimyoviy formulasi $C_6H_5NO_2$. Quydagi 3-rasmda nitrobenzol molekulasining struktura formulasi keltirilgan.



3-rasm. Nitrobenzol molekulasining struktura formulasi

Moddani eksperimentga tayyorlash

Ma'lumki kombinatsion sochilish spektrining sifati va yaxshiroq foydali signal olish moddaning oldindan ishlov berish o'lchashga yaroqli bo'lgan spektrlarini olish uchun bajarilishi zarur bo'lgan quyidagi asosiy talablar bilan aniqlanadi:

a) Nomolekulyar sochilishni kamaytirish uchun modda aralashmay qolgan zarrachalardan ozod bo'lishi kerak.

Modda iloji boricha toza bo'lishi kerak. Fluoresensiya tozalanmagan



suyuqliklarda kam miqdordagi aralashmalarning borligi tufayli kelib chiqqan Fluoresensiya natijasida kuchli fon hosil bo‘ladi va spektrni kuzatishda, ayniqsa tekshirilayotgan moddaning kichik konsentratsiyalarini o‘lchashga halaqit beradi.

b) Modda iloji boricha rangsiz bo‘lishi kerak. Hamma tekshirilayotgan moddalar markalaridan olingan, shundan keyin ularga qo‘shimcha ishlov beriladi. Suyuqlik oldindan fosfor V oksidi (F_2O_5) yordamida quritiladi. Chunki suv miqdori kuchayishga va kombinatsion sochilishning susayishiga olib keladi. Binar aralashmalarini tayyorlashda konsentratsiya eritilgan modda molekulari sonining erituvchi molekulari soniga nisbati ko‘rinishida hisoblanadi (nisbiy molyar tarkib). Binar aralashmalarni taqqoslashni osonlashtirish uchun nisbiy molyar tarkibni eritilgan modda va erituvchi konsentratsiyasining nisbati orqali ifodalash mumkin. 1:1 konsentratsiyada eritilgan modda molekulari soni erituvchi moddalarning molekulari soniga teng bo‘ladi va bu xolda nisbiy molyar tarkibni modda hajmlarining nisbati orqali quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\frac{M_{\alpha} \cdot d_{\beta}}{M_{\beta} \cdot d_{\alpha}} = \frac{V_{\alpha}}{V_{\beta}}$$

M_{α} va M_{β} - eritilgan modda erituvchining molekulyar og‘irligi.

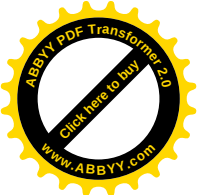
d_{α} va d_{β} - ularning zichliklari.

V_{α} va V_{β} - ularning hajmlari (cm^3 da)

Formuladan ko‘rinadiki, istalgan konsentratsiyani eritilgan modda va erituvchi hajmlarning nisbati orqali ifodalash mumkin. Idishni to‘ldirish va kerakli konsentratsiyani tayyorlash uchun shpritsdan foydalaniladi. Bunday oddiy qurilma kerakli konsentratsiyadagi eritmani tez va aniq tayyorlashga imkon beradi.

2.3 § Kvanto-kimyoviy hisoblashlarni baholash va uning xatoligi

Noempirik hisoblashlar taklif qilingan modelning o‘lchangan natijalar bilan adekvatligini ta’minlash uchun molekulyar sistemalarda ma’lum bir yaqinlashishlar orqali Shredinger tenglamasining yechimini topish jarayoni deb



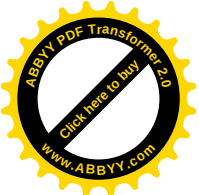
qarash mumkin. Tajriba orqali olish mumkin bo'lmagan, murakkab molekulyar tuzilmalarning va effektlarning xossalarini hisoblash uchun ko'pincha noempirik hisoblashlar – «ab initio» (lotinchadan «Boshlang'ich») qo'llaniladi [21].

Bugungi kunda amaliyotda noempirik hisoblashlar uchun zamonaviy Gaussian dasturlarini qo'llab yuqori darajadagi aniqlikga erishish mumkin. **Gaussian** (*gaussian*) – molekulyar modellashning turli-tuman usullarini o'zida mujassamlashtirgan molekulyar sistemalarning tuzilishi va xossalarini hisoblashga qaratilgan kompyuter dasturi. Bu dastur nobel mukofoti laureati Djon Poplo va uning tadqiqot guruhi tomonidan yaratilgan bo'lib, bugungi kunda ham yangilanib kelinmoqda. Dasturning Gaussian-2003 (G03) versiyasi Gaussian-98 (G98) versiyasidan farq qiladi. Dasturning foydalanishdan eng so'nggisi Gaussian-09 hisoblanadi [21].

G98 i G03 dasturiy majmuaning asosiy imkoniyatlari quyidagilardan iborat:

- Tadqiq qilinayotgan sistemaning molekulyar mexinika usullari, yarimempirik yaqinlashishlar, chegaralangan va chegralanmagan Xartri – Fok usuli yoradamida tuzilishini optimizasiya qilish va energiyasini hisoblash;
- Korrelyatsion energiyani hisobga olish imkoniyatiga ega bo'lib, analitik gradiyentlar yordamida g'alayonlanish nazariyasi, bog'langan klasterlar, konfigurasion o'z'aro ta'sir va boshqalar uchun energiyani hisoblash;
- Yuqori molekulyar sistemalarni modellash;
- Kuch doimiylarini RHF, UHF, DFT, RMP2, UMP2 va CASSCF usullar yordamida analitik hisoblash;
- Molekulaning spektral xossalarini hisoblash;
- Tadqiq qilinayotgan sistema uchun eritmaning ta'sirini hisobga olish imkoniyati va hakozi.

Gaussian dasturiy majmuasining kamchiligi sifatida hisoblash vaqtining kattaligi va hisoblash apparatlariga bo'lgan talabning yuqoriligini keltirish mumkin [21]. Hisoblashlar natijalari tadqiq qilinayotgan molekulalar (fazodagi yadrolar joylashishi) tuzilishi, elektron zichligi, molekula va uning tashkil etuvchilarining

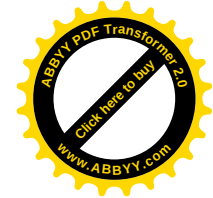


umumiy energiyasi va hakovolar to'g'risida juda keng sonli ma'lumotlar to'plangan fayl ko'rnishida bo'ladi. Shuning uchun Gaussian dasturiy majmuasining hisoblash natijalarini tahlil qilish o'rganish uchun maxsus dasturlar qo'llaniladi.

Xuddi shunday dasturlardan eng ko'p ishlatiladiganlaridan biri GaussView – dasturi imkoniyatlariga qisqacha to'xtalib o'tmoqchimiz. GaussView (<http://www.gaussian.com/>) dasturi Gaussian dasturiy majmuasi yordamida amalga oshirilgan kvanto-ximik hisoblash natijalarini interpretatsiya qiladi. Bu dasturning imkoniyatlaridan biri hisoblanayotgan brikmaning boshlang'ich geometriyasini interaktiv rejimda tayyorlash imkoniyatini berib, kirish faylini (Gauss Job File) hosil qilish va hisoblashlarni kuzatib borish imkoniyatini beradi.

Endi qisqacha, noempirik hisoblashlarning xatoliklariga to'xtalib o'tsak, hisoblash natijalarini tajriba natijalari bilan taqqoslash jarayonida xatoliklar va yuqori aytib o'tganimizdek, turli xil ko'paytuvchilarni bilish muhim ahamiyatga ega. Barcha noempirik hisoblashlarda xatoliklar qisqa bazis to'plamlarini qo'llaganda oshib ketishi mumkin. Noempirik hisoblashlarda Xartri-Fok usulida organik molekulalar uchun DZP yoki 6-31G*: dan kichik bo'lmagan bazislar to'plamida natijalarda quyidagi xatoliklar uchraydi:

- bog'lanish uzunliklari 0,01 – 0,02 Å aniqlikda hisoblanadi;
 - elektron zichlik - 10%;
 - bog'lanish uzunliklari va valent burchaklar - ~ 1 %;
 - konformatsion o'tishlar (aylanish) energiyasi - < 2 kkal/mol;
 - tebranish chastotalari 10-12 % ga yuqori hisoblanadi. $0,89 \pm 0,01$
- ko'paytuvchi orqali tajriba bilan mos keltirish mumkin.

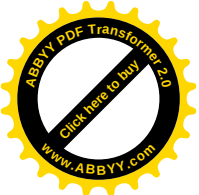


III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

3.1 §. Nitrobenzol va uning eritmalarida kombinatsion sochilish spektrlarini o'rganish

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan yana biri vodorod bog'lanishlardir. Agar vodorod atomi molekuladagi kuchli elektromanfiylikka ega bo'lgan atom bilan kimyoviy birikkan bo'lsa, u boshqa molekulaning yoki xuddi shu molekulaning boshqa manfiy zaryadli atomi bilan yana bir qo'shimcha bog'lanishlar hosil qiladi. Lekin bu ikkinchi bog'lanish oddiy bog'lanishga qaraganda bo'shroq bo'ladi. Bu turdagi bog'lanishga vodorod bog'lanish deb nom berilgan. Vodorod bog'lanish shartli ravishda A-H...B deb belgilanadi [22-25]. Bunda A-H bog'lanishdagi elektronlarning zichligi, A atomiga tomon kuchli siljigan bo'ladi. Buning natijasida vodorod atomi yaqinida elektronlar juda siyrak bo'ladi, ya'ni yalong'ochlangan protonning yakka o'zi qoladi va ajoyib xususiyatga ega bo'ladi. Shuning uchun ham vodorod ioni boshqa molekulalarning manfiy zaryadli B atomiga tortiladi. Boshqa atomlar esa B ga yaqinlashganda itarishadi, chunki B ning manfiy zaryadi bilan molekulalarning elektron qobig'i ta'sirlashadi [23-24]. Molekulalararo vodorod bog'lanishlar turli tarkibdagi qo'shilmalarning hosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Vodorod bog'lanishning eng ko'p turi ayni bir birikmaning ikki molekulasi orasida bog'lanishlardan iborat. Hosil bo'lgan komplekslar dimerlar deyiladi. Bundan tashqari bir vaqtning o'zida bir necha bir xil yoki har xil molekulalar vodorod bog'lanish orqali o'zaro bog'lanishi mumkin. Ular trimer, tetramer va hakoza bo'lishi mumkin. Molekulalararo vodorod bog'lanish ko'pchilik organik birikmalar uchun xosdir. Suyuqliklarda molekulalararo vodorod bog'lanish va komplekslar hosil bo'lishi bo'yicha juda ko'plab tadqiqot ishlari olib borilmoqda [26-33].

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'yektlar uchun, vodorod bog'lanish va Van-dyer-vaals molekulalararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molekulyar agregatlarni o'rganishda yangi kvanto-ximik hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning "spektri, tuzilishi va xossalari" orasidagi bog'lanishlarni o'rnatish hamda



molekulalararo o'zaro ta'sirlarni, molekulalar agregatlanishini va ularni o'rganish turgan muhitning molekulaning spektral parametrlariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega [34-37]. Noempirik hisoblash usullari molekulalarning geometrik va elektron tuzilishi, tebranish chastotalarini va spektroskopik xarakteristikalarini aniqlash imkonini beradi. Shu munosabat bilan hisoblash usullari juda tez suratlar bilan rivojlandi. Bu usullar yordamida molekulalarning geometrik strukturalari, energiyalari, dipol momenti, o'tishlar orasidagi va tebranishlar chastotalarini hisoblash imkoniyatlari paydo bo'ldi. Shu maqsadda suyuqliklardan nitrobenzol ($C_6H_5NO_2$) molekulasini tanlab oldik.

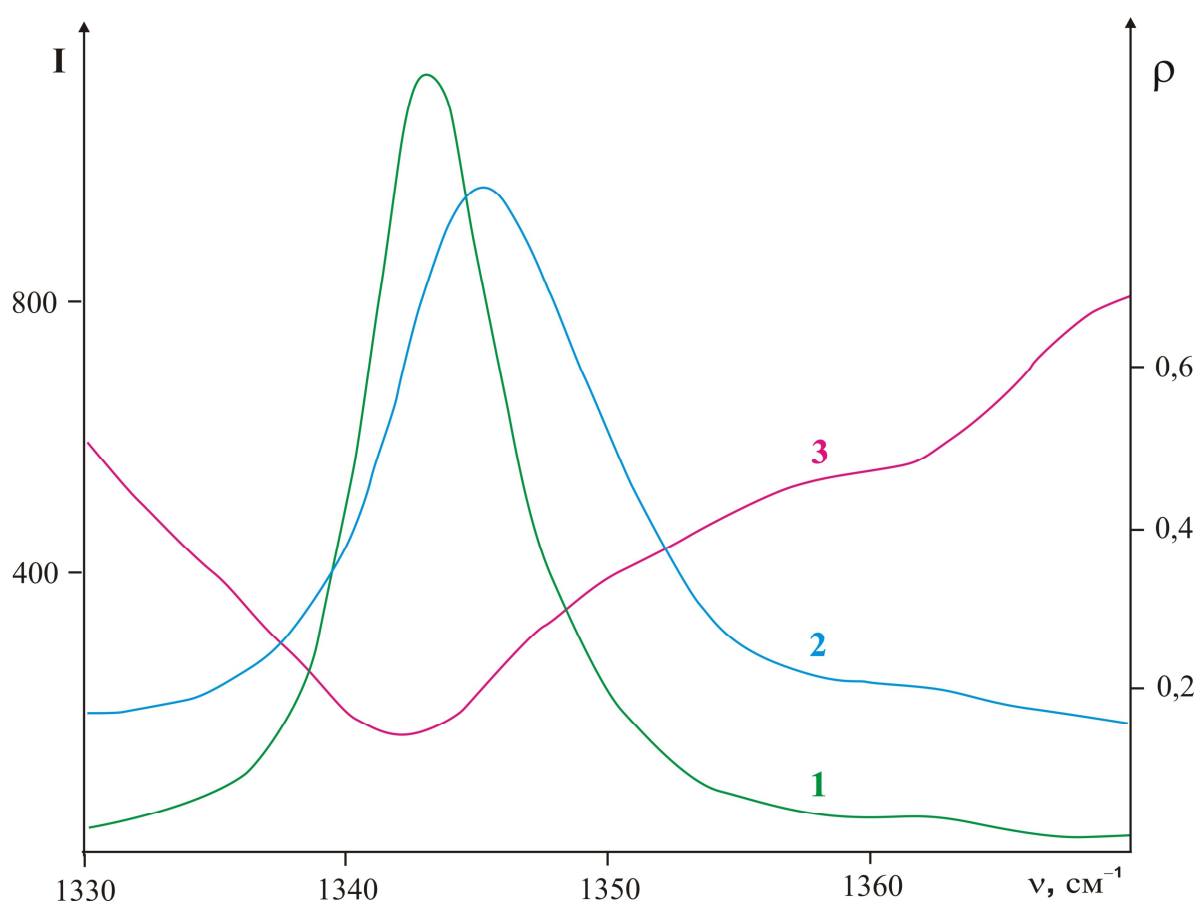
Biz nitrobenzol molekulasining 1343 cm^{-1} spektral chizig'ini kombinatsion sochilish spektrida namoyon bo'lishini o'rgandik. Nitrobenzoldagi NO_2 guruhining o'ziga xos xususiyatlari mavjud. Aynan shu guruhda zaryad miqdori jamlangan bo'lib, katta dipol momentiga ega va molekulalararo o'zaro ta'sirda aktiv ishtrok etadi. Tadqiqot ishlari suyuq nitrobenzol va uning geksan bilan eritmasidagi kombinatsion sochilish spektrlari o'rganilgan [38-39].

Ushbu bitiruv malakaviy ishida biz nitrobenzol molekulalarining agregatsiyasini qo'shimcha eksperiment tadqiqotlardan biri noemperik hisoblashlar bilan o'rgandik. Molekulalarning o'zaro oriyentasiyasi, bog'lanish uzunliklari, tebranish chastotalari, dimer hosil bo'lish energiyalari, zaryadlarning o'zaro taqsimlanishilari o'rganildi.

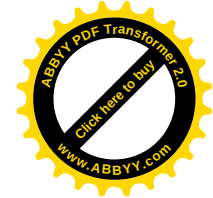
Tadqiqot natijalari avtomatlashtirilgan DFS-52 spektrometrida qayt etildi. Uyg'otuvchi yorug'lik manbai sifatida to'liq uzunligi 632,8 nm ga teng bo'lgan geliy-neon lazeridan foydalanildi [16]. O'tkazilgan tajriba natijalarini to'laroq tushuntirish maqsadida kvanto-kimyoviy hisoblashlar olib borildi. Kvanto-kimyoviy hisoblashlar Gaussian-98 dasturi asosida B3LYP yaqinlashishida 6-31G (d,p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi [21].

Olingan tajriba natijalariga to'xtalib o'tamiz. 4-rasmda toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi 1343 cm^{-1} spektral chizig'i keltirilgan. Bu spektral chiziq nitrobenzol molekulasining N-O tebranishiga tegishlidir. 4-rasmning 1-chizig'i toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi

1343 cm^{-1} spektral chizig'ining parallel tashkil etuvchisi keltirilgan bo'lib, bu spektral chiziqning maksimumi 1343,2 cm^{-1} ga, yarim kengligi esa 6,2 cm^{-1} ga teng ekan. 2-chizig'i esa toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi 1343 cm^{-1} spektral chizig'ining perpendikulyar tashkil etuvchisi keltirilgan bo'lib, bu spektral chiziqning maksimumi 1345 cm^{-1} ga, yarim kengligi esa 8,8 cm^{-1} ga teng ekan. Toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari bir-biriga mos tushmas ekan. Ular orasidagi farq 1,8 cm^{-1} tashkil etar ekan. Bunday spektral chiziqlarning o'zaro mos tushmasligi, polosaning murakkabligidan dalolat beradi. Depolyarizatsiya koeffitsiyentidan ham ko'rinib turibdiki, spektral chiziq murakkab bo'lib, depolyarizatsiya koeffitsiyenti ham assimetriyaga egadir (3-chiziq).



4-rasm. Nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektridagi 1343 cm^{-1} spektral chizig'i. 1- parallel tashkil etuvchisi; 2 - perpendikulyar tashkil etuvchisi; 3 - depolyarizatsiya koeffitsienti



Biz bu rasmda yuqori chastota sohasida antisimmetrikni ko'rishimiz mumkin va buni tushuntirish uchun adabiyotlarda ko'rsatilganidek bu holatda modda tarkibida dimerlar va hamda boshqa tegishli agregatlar mavjud. Demak, biz tanlagan moddamiz murakkab tarkibga ega ekan. Bundan tashqati, depolyarizatsiya koeffitsiyentining minimum qiymati tebranish polosasining maksimumiga to'g'ri keladi. Bunda depolyarizatsiya koeffitsiyenti ham antisimmetriklikka ega bo'lib, $\rho=0,19$ ga teng.

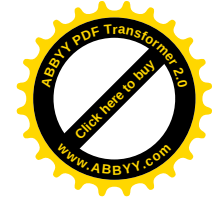
Biz bu murakkablikni bartaraf etish uchun bizda ikkita yo'l mavjud. Bulardan biri moddani temperaturasini oshirganimizda molekula elektronlarining tebranishi oshadi va natijada bog' uzulishi mumkun. Baholanki, molekuladagi dimerlar va boshqa aggregatsiyalarga tegishli chiziqlar yo'qoladi. Shu bilan birga bizda ikkinchi yo'l ham bor, ya'ni moddani agregatsiyalardan ajratib (buzib) yuboraydigan modda bilan aralashtirishimiz kerak. Bu buzuvchi moddalarga Mendeleev jadvalining VIII gruhning inert erituvchilarni olishimiz mumkin (Ar-Argon, Ne-Neon, Kr- Krypton va hokozalar misol bo'ladi).

Nitrobenzolning geksandagi eritmalarida kombinasion sochilish spektrlarini o'rganish bu spektral chiziqlarni ajratish imkoniyatini beradi. Biz nitrobenzolning geksan bilan turli konsentratsiya eritmalarida natijalar oldik. 1-jadvalda nitrobenzolning kombinasion sochilish spektrlaridagi N-O tebranishga tegishli polosasining 1343 sm^{-1} spektral chizig'i keltirilgan.

1-jadval

Nitrobenzol va geksan bilan turli xil konsentratsiyalardagi tajriba natijalari

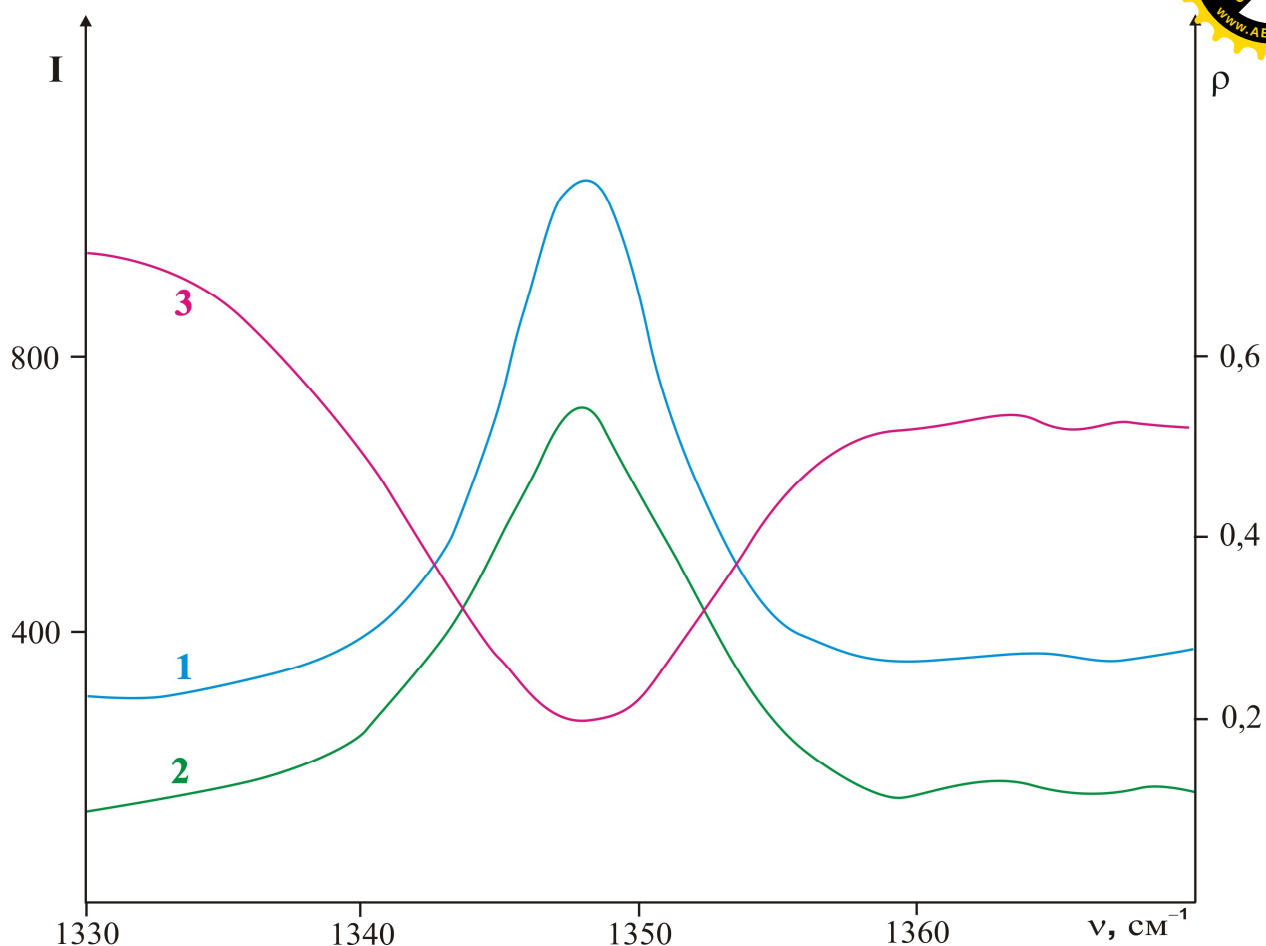
Konsentratsiya, m.u	Perpendikulyar, ν, sm^{-1}	Perpendikulyar, $\nu_{1/2}$, sm^{-1}	Parallel, ν, sm^{-1}	Parallel, $\nu_{1/2}$, sm^{-1}	$\nu_{//} - \nu_{\perp}$, sm^{-1}
1	1345	8,8	1343,2	6,2	1,8
0,9	1345,6	8,9	1343,8	5,8	1,8
0,7	1345,7	8,5	1344,0	5,9	1,7
0,3	1345,5	8,1	1344,5	5,7	1,0
0,2	1345,6	8,0	1344,8	5,4	0,8
0,05	1346,3	7,6	1346,1	4,6	0,2



Tajribani davom ettirib konsentratsiya o'zgarishi bilan, ya'ni geksan miqdori oshib borishi bilan chastotaning tashkil etuvchilari yuqori chastota tamonga siljiganligini va yarim kengliklar sezilarli ravishda kamayganligini ko'rishimiz mumkin (0,9 m.u.). Shuningdek, 0,7 m.u dan boshlab chastotalarning parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari orasidagi farq kamayganligini ko'rishimiz mumkin (1.8 sm^{-1} dan 1.7 sm^{-1} ga). Va keyingi hollarda (0,3; 0,2; 0,05 m.u.) biz bir hil o'zgarishni ya'ni chastotaning parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarning yuqori chastota tomonga siljiganini hamda ular orasidagi farq kichirayib ketayotganini va shu bilan birga yarim kengliklarning qiymati kamayotganini tajribadan ko'rishimiz mumkun.

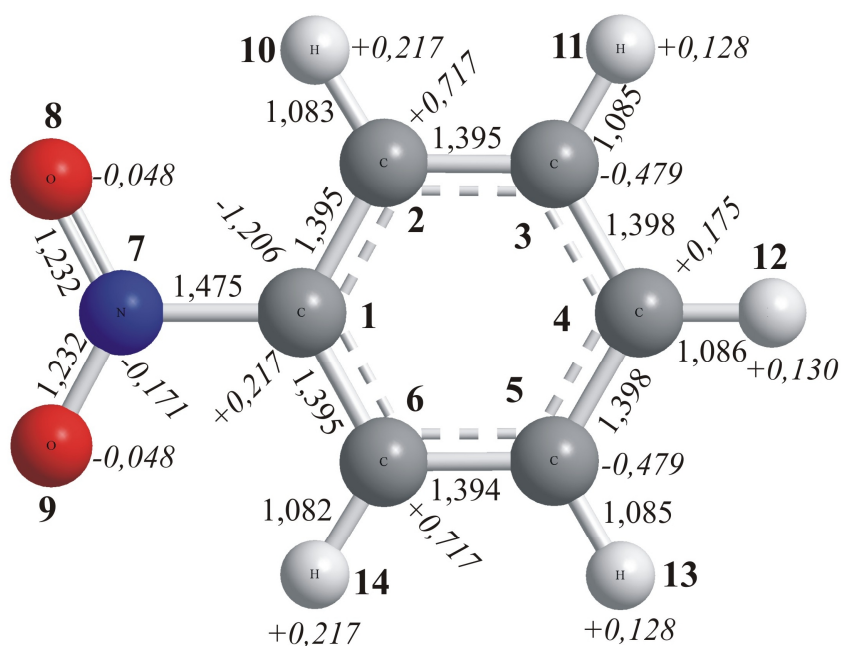
Tajriba natijalaridan xulosa qilib aytadiga bo'lsak, toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari bir-biriga mos tushmas ekan. Ular orasidagi farq $1,8 \text{ sm}^{-1}$ tashkil etar ekan. Nitrobenzolni inert erituvchi geksanda eritganimizda konsentratsiya oshib borishi bilan chastotaning tashkil etuvchilari yuqori chastota tomonga siljib, yarim kengliklari sezilarli ravishda kamayib borar ekan.

Quyidagi 5-rasmda nitrobenzolning geksan bilan 0,5 mol ulushdagi 1343 sm^{-1} spektral chizig'i keltirilgan. Bu olingan tajriba natijasidan biz parallel va perpendikulyarlarning maksimumdagi chastotalari bir-biriga yaqinlashganini ko'rishimiz mumkun. Bundan tashqari intinsivlikning parallel va perpendikulyarlar tashkil etuvchilarning nisbati depolyarizatsiya koeffitsiyenti biroz o'gargan. Nitrobenzol molekularining o'zaro ta'sirini inert erituvchi geksanni qo'shish tufayli simmetriklikga yaqinlashayapti deb tushuntirdik. Xulosa qilib aytadigan bo'lsak, nitrobenzolni inert erituvchi geksanda eritganimizda nitrobenzol molekualalari orasidagi o'zaro ta'sirni buzib, suyuqlikda monomerlar soni oshishiga olib kelar ekan.



5-rasm. Nitrobenzolning geksan bilan eritmasidagi 1343 cm^{-1} spektral chizig'i (0,5 m.u.). 1- parallel tashkil etuvchisi; 2 - perpendikulyar tashkil etuvchisi; 3 - depolyarizatsiya koeffitsienti

Olingan tajriba natijalarini to'laroq tushuntirish maqsadida, nitrobenzol molekulasini monomer va dimer uchun kvanto-kimyoviy hisoblash o'tkazdik. 6-rasmda nitrobenzol molekulasini monomer uchun o'tkazilgan hisoblash natijalari keltirilgan. Rasmdan ko'rinadiki, barcha vodorod atomlari musbat zaryadlangan kislorod va azot atomlari, shuningdek ayrim uglerod atomlari esa manfiy zaryadlangan. Nitrobenzol molekulasini monomer uchun atomlarning bog' uzunliklari va zaryadlar taqsimoti 2-jadvalda keltirilgan.



6-rasm. Nitrobenzol molekulası monomeri uchun kvanto-kimyoviy hisoblashlar

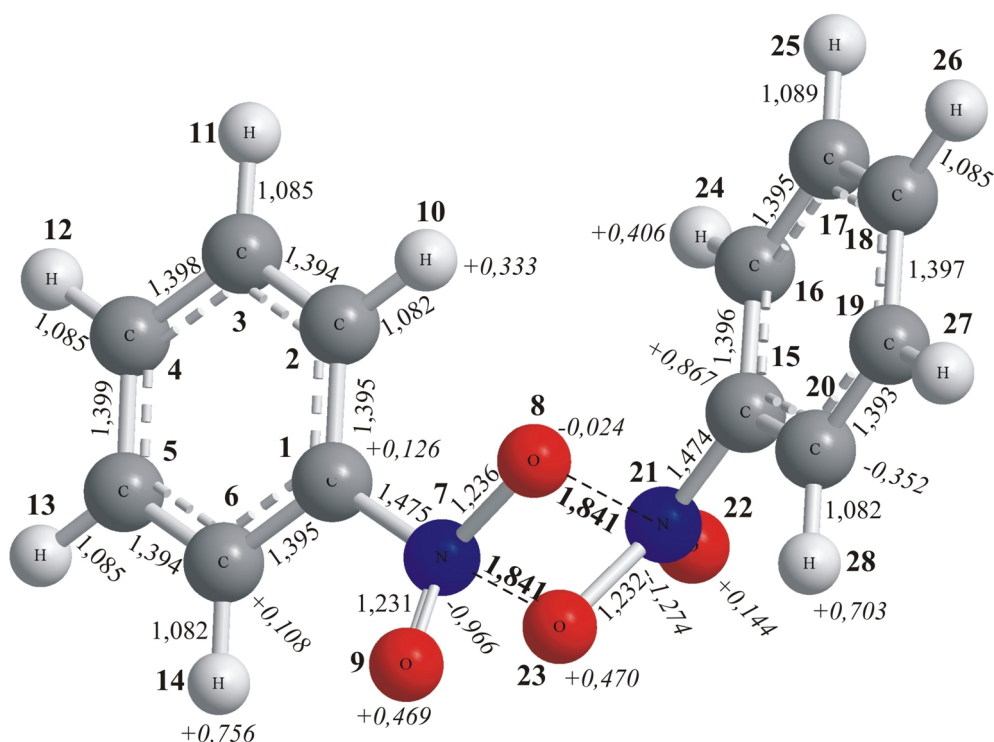
2-jadval

Nitrobenzol molekulası monomeri uchun atomlarning bog' uzunliklari va zaryadlar taqsimoti

Atomlar nomi	Atomlar orasidagi masofa	Atom nomi	Zaryadi
C ¹ -C ²	1,395	C ¹	-0,126
C ² -C ³	1,395	C ²	+0,717
C ³ -C ⁴	1,398	C ³	-0,478
C ⁴ -C ⁵	1,398	C ⁴	+0,175
C ⁵ -C ⁶	1,394	C ⁵	-0,479
C ⁶ -C ¹	1,395	C ⁶	+0,717
C ¹ -N ⁷	1,475	N ⁷	-0,171
N ⁷ -O ⁸	1,232	O ⁸	-0,048
N ⁷ -O ⁹	1,232	O ⁹	-0,048
C ² -H ¹⁰	1,083	H ¹⁰	+0,217
C ³ -H ¹¹	1,085	H ¹¹	+0,128

C^4-H^{12}	1,086	H^{12}	+0,130
C^5-H^{13}	1,085	H^{13}	+0,128
C^6-H^{14}	1,082	H^{14}	+0,217

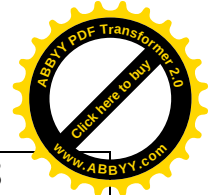
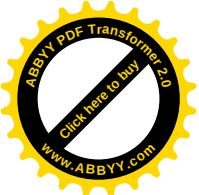
7-rasmda nitrobenzol molekulasini dimeri uchun o'tkazilgan hisoblash natijalari keltirilgan. Hisoblashlar ko'rsatdiki, nitrobenzol molekulasini o'zaro ikki xil molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilgan ekan. Birinchi molekulalararo vodorod bog'lanish birinchi nitrobenzol molekulasining 7N atomi bilan ikkinchi nitrobenzol molekulasining 23O atomi orasida hosil bo'lib, bu bog' uzunligi 1,841 Å ga teng ekan. Ikkinchi molekulalararo vodorod bog'lanish esa birinchi nitrobenzol molekulasining 8O atomi bilan ikkinchi nitrobenzol molekulasining 21N atomi orasida hosil bo'lib, bu bog' uzunligi ham 1,841 Å ga teng ekan. Dimer hosil bo'lish energiyasi 2,1 kkal/molni tashkil etgan ekan. Nitrobenzol molekulasini dimeri uchun atomlarning bog' uzunliklari va zaryadlar taqsimoti qayta taqsimlanar ekan. Nitrobenzol molekulasini dimeri uchun hisoblash natijalari 2-jadvalda keltirilgan.



7-rasm. Nitrobenzol molekulasini dimeri uchun kvanto-kimyoviy hisoblashlar
2-jadval

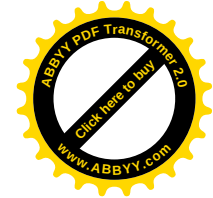
Nitrobenzol molekulasi dimeri uchun atomlarning bog' uzunliklari va zaryadlar taqsimoti

Atomlar nomi	Atomlar orasidagi masofa	Atom nomi	Zaryadi
C ¹ -C ²	1,395	C ¹	+0,126
C ² -C ³	1,394	C ²	-1,099
C ³ -C ⁴	1,398	C ³	-0,530
C ⁴ -C ⁵	1,399	C ⁴	-0,642
C ⁵ -C ⁶	1,394	C ⁵	-0,451
C ⁶ -C ¹	1,395	C ⁶	+0,108
C ¹ -N ⁷	1,475	N ⁷	-0,966
N ⁷ -O ⁸	1,236	O ⁸	-0,024
N ⁷ -O ⁹	1,231	O ⁹	+0,469
C ² -H ¹⁰	1,082	H ¹⁰	+0,333
C ³ -H ¹¹	1,085	H ¹¹	+0,399
C ⁴ -H ¹²	1,085	H ¹²	+0,660
C ⁵ -H ¹³	1,085	H ¹³	+0,835
C ⁶ -H ¹⁴	1,082	H ¹⁴	+0,756
C ¹⁵ -C ¹⁶	1,396	C ¹⁵	+0,867
C ¹⁶ -C ¹⁷	1,395	C ¹⁶	-1,250
C ¹⁷ -C ¹⁸	1,400	C ¹⁷	-0,318
C ¹⁸ -C ¹⁹	1,397	C ¹⁸	-0,768
C ¹⁹ -C ²⁰	1,393	C ¹⁹	-0,537
C ¹⁵ -C ²⁰	1,394	C ²⁰	-0,352
C ¹⁵ -N ²¹	1,474	N ²¹	-1,274
N ²¹ -O ²²	1,232	O ²²	+0,144
N ²¹ -O ²³	1,232	O ²³	+0,470
C ¹⁶ -H ²⁴	1,082	H ²⁴	+0,406
C ¹⁷ -H ²⁵	1,089	H ²⁵	+0,527



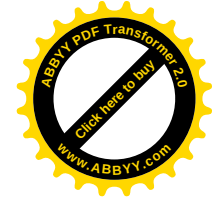
$C^{18}-H^{26}$	1,085	H^{26}	+0,648
$C^{19}-H^{27}$	1,085	H^{27}	+0,754
$C^{20}-H^{28}$	1,082	H^{28}	+0,703

O'tkazilga hisoblash natijalaridan xulosa qilib aytadiga bo'lsak, nitrobenzol molekulasi o'zaro molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan.



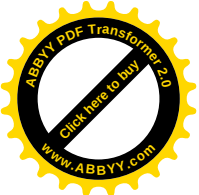
XULOSA

1. Toza nitrobenzolning kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari o'zaro mos tushmas ekan. Chastotalar orasidagi farq $1,8 \text{ sm}^{-1}$ tashkil etar ekan.
2. Nitrobenzolni inert erituvchi geksanda eritganimizda konsentratsiya oshib borishi bilan parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining maksimumlari yuqori chastota tomonga siljib, yarim kengliklari sezilarli ravishda kamayib borar ekan.
3. Nitrobenzolni geksan eritmasida konsentratsiya oshishi bilan parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari orasidagi farq kamayib borar ekan.
4. Nitrobenzol geksan eritmasida (0,5 m.u.) inert erituvchi geksan nitrobenzol molekualalari orasidagi o'zaro ta'sirni buzib, suyuqlikda monomerlar soni oshishiga olib kelar ekan.
5. Kvanto-kimyoviya hisoblashlar ko'rsatdiki, nitrobenzol molekualalari o'zaro ikki xil molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan. Dimer hosil bo'lish energiyasi $2,1 \text{ kkal/mol}$ ni tashkil etar ekan.

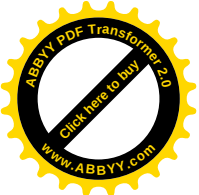


FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Бахшиев М.Г. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий. – Ленинград: Наука. 1972, с.4-22.
2. Шахпаронов М.И. Межмолекулярные взаимодействия. Москва: Знание. 1983. - 64 с.
3. Ландсберг Г.С. Оптика. Тошкент "Ўқитувчи" - 1981 йил.
4. Орлова Н.Д. Молекулярная спектроскопия. 1981. И5
5. Ferraro J.R., Nakamota K. Introductory Raman Spectroscopy. Academic. Press Jns. 1994. p.363.
6. Горелик В.С. Современные проблемы спектроскопии комбинационного рассеяния света. // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 8. С. 78-86.
7. Фабелинский И.Л. Комбинационному рассеянию. УФН. 1998. №12 168. С.1341-1360.
8. Ландсберг Г.С. Оптика, Тошкент, «Ўқитувчи», 1981.
9. Брандмюллер И. Мозер Г. Введение в комбинационная спектроскопия. Мир - 1972 г.
10. Кальрауш К. Спектры комбинационного рассеяния. М.Изд-во ИЛ. 1952. С.217.
11. Pople J. A., Gill P. M. W. and Johnson B. G. "Kohn-Sham density-functional theory within a finite basis set"// Chemical Physics Letters.1992. 199, p.557.
12. Бурштейн К.Я., Шорыгин П.П. Квантово-химические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии. -М.: Наука, 1989. -104 С.
13. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-ва "Мир" и "МГУ", М., 2001, -518 С.
14. Бабушкин А.А., Бажулин П.А., Королев Ф.А., Левшин Л.В., Прокофьев В.К., Стриганов А.Р. Методы спектрального анализа. М., 1962, - 508 С.



15. Раутиан С.Т. Реальные спектральные приборы // Усп. физ. наук. 1955, Т. 66. Вып. 3. С. 475-517.
16. Технический описание спектрометра ДФС-52.
17. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. Ленинград, Химия. 1991. С.432.
18. www.google.co.uz
19. www.ziyonet.uz
20. www.vikpedia.uz
21. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
22. Соколов Н.Д. Водородная связь. М.: Наука, 1981, -287 С.
23. Соколов Н.Д. Водородная связь. Успехи физических наук. 1955, Т. LVII, вып 2. С. 205-278.
24. Пиментал Дж., Мак-Клелан О. Водородная связь. -М.:Мир. 1964, С.462.
25. Pimentel G.C., McClellan A.L. The Hydrogen Bond, Freeman: San Francisco, 1960. p. 195.
26. Tukhvatullin F.H., Hudayberdiev B.G., Jumabaev A., Hushvaktov H.A., Absanov A.A. // J. Mol. Liq. 2010, 155, pp. 67-70.
27. Deckret V., Asthana B.P., Mishra P.C., Kiefer W. // J. Raman Spectrosc. 1996, V. 27, Is.12, pp. 907-913.
28. Singh R.K., Srivastava S.K., Ojha A.K., Arvind U., Asthana B.P. // J. Raman Spectrosc. (Kiefer special issue), 2006, 37, pp.76-84.
29. Ojha A.K., Srivastava S.K., Schlucker S., Kiefer W., Asthana B.P., Singh R.K //J. Raman Spectrosc. 2007, 38, pp.1656-1664.
30. Cabaco M.I., Tassaing T., Danten Y., Besnard M. // Chem. Phys. Lett, 2000, 325, pp. 163.
31. Lalanne L., Tassaing T., Danten Y., Besnard M. // J. Mol. Liq. 2002, 98-99, pp. 201
32. Schlucker S., Singh R.K., Asthana B.P., Popp J., Kiefer W. // J. Phys. Chem. A, 2001, 105 (43), pp 9983–9989.



33. Singh R.K., Bharguvansh P., Asthana B.P., Verma A.L. // Chem. Phys. Lett., 1998. T. 296. № 5-6. С. 611-618.
34. Berg E.R., Freeman S.A. Green D.D., Ulness D.J. // J. Phys. Chem. A, 2006, 110, pp. 13434-13446.
35. Szatyłowicz H. // J. Phys. Org. Chem., 2008, 21, pp. 897-914.
36. Ribeiro-Claro P.J.A. Vaz P.D. // Chem. Phys. Lett., 2004, V. 390, Is. 4-6, pp. 358-361.
37. Hobza P., Spirko V. Selzle H.L. Schlag E.W. // J. Phys. Chem. A. 1998, 102 (15), pp. 2501-2504.
38. Атаходжаев А.К., Османов С., Жумабоев А., Ташкенбаев У. // Изв.ВУЗов, сер.физ.1991, №4, с.31-33.
39. Атаходжаев А.К., Жумабоев А., Клейнер И.П., Абдуллаев Г.А., Ташкенбаев У. // Журнал физич. Химии 1992, т.66, №2, с.493-497.