

O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY VA O‘RTA MAXSUS TA‘LIM VAZIRLIGI

QARSHI DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA-MATEMATIKA FAKULTETI
FIZIKA KAFEDRASI

PARDAYEVA MUXLISA ABDUQODIR QIZINING

“5140200 — Fizika” ta‘lim yo‘nalishi bo‘yicha
bakalavr darajasini olish uchun

**KOMBINATSION SOCHILISH SPEKTRI YORDAMIDA PIRIDIN VA UNING
ERITMALARIDA MOLEKULALARARO O‘ZARO TA‘SIR KUCHLARINI
O‘RGANISH**

mavzusida yozgan

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Ilmiy rahbar:

dots.B. Qo‘lyiyev

“Himoyaga tavsiya etilsin”

Fizika – matematika fakulteti

dekani: _____ prof. A.Tashatov

“ _____ ” _____ 2015 yil

Mundarija

Kirish.....	3
I Bob. Yorug'likning muhitlardan molekular sochilishi	
1. 1 Suyuqliklarda yorug'likning sochilishi, A.Eynshteyn nazariyasi	6
1. 2 Vodород bog'lanish(H- bog'lanish) va uning tabiati	15
1. 3 Kombinatsion sochilishi va uning kvant nazariyasi	19
1. 4 Molekulalararo o'zaro ta'sir	28
II Bob. Tajribalar texnikasi va metodikasi	
2. 1 Tajriba o'tkazadigan qurilma va uning ishlash usuli.....	35
2. 2 O'rganilayotgan obektlarni tajribaga tayyorlash	40
2. 3 Azotli molekula piridinning monomer va dimer agrigatsiyalari	42
2.4 Olingan natijalar va ularning tahlili.....	44
Xulosa.....	47
Adabiyotlar.....	48

Kirish

Hozirgi kunda yorug'likning moddalar bilan o'zaro tasiri tufayli kelib chiqadigan hodisalarni o'rganishga qiziqish juda katta. Sababi modda molekulalarini tavsiflashda ularning tuzilishi va xossalari o'rganishda muhim ma'lumotlar manbai hisoblanadi. Chunki yorug'lik muhitdan sochilganda nafaqat yorug'likning xossalari namoyon bo'ladi, balki shu nur bilan ta'sirlashgan moddaning xossalari ham namoyon bo'ladi.

Bitiruv malakaviy ishining dolzarbligi: Mavzu Kombinasion sochilish spektri yordamida Piridin va uning eritmalarida molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini o'rganish deb tanlanishida ham modda molekulasining tuzilishi va xossasi, suyuqlik va kristallarning yuqori molekularli moddalarning va kolloid sistemalarning tuzilishi va xossalari o'rganish eng dolzarb muammo hisoblanadi. Bunday muammolarga yechim topish fizika, ximiya, meteorologiya, astronomiya va texnikaning ko'plab sohalarini yaxshi rivojlanishiga olib kelishi mumkin.

Bitiruv malakaviy ishining maqsadi va vazifalari: Piridinning xususiyatlarini yorug'likning kombinatsion sochilishi spektri orqali aniqlashdan iborat. Buning uchun DFS-52 spektrometri tajriba qurilmasi sifatida ishlatiladi. Yorug'lik manbai sifatida esa $\lambda = 4480 \text{ \AA}$ to'lqin uzunlikli argon lazeridan foydalanildi qurilmaning tavsifi ikkinchi bobda batafsil yoritilgan. Agar biz suyuqliklar va gazlar yoki muhitlarda bo'ladigan fizik jarayonlarini to'g'ri baholay olsak ulardan ishlab chiqarishda to'g'ri foydalana olamiz. Bu o'z navbatida iqtisodiy samaradorlikni oshirish bilan bir qatorda bizni tabiat haqidagi bilimlarimizni bir butunlikka olib keladi.

Bitiruv malakaviy ishining ilmiyligi va ahamiyati: Piridinda ichki molekulyar va molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlar tabiatini tushunishga harakat qilindi

Nozik optik rostlash talab etiladigan qurilma va lazerlar bilan ishlash o'rganildi. Olingan natijalar tahlili bitiruv malakaviy ishida keltirilgan .

BMI dan maxsus kurslardan ma'ruza o'qishda Bakalavr bitiruv malakaviy ishi, Magistrlilik disirtatsiyasini yozishda Tatqiqotchilar ilmiy ishlarini bajarishda foydalanishi mumkin. Xuddi shunday piridin ishlatiladigan ishlab chiqarish korxonalariga amaliy ilmiy tavsiyalar berish ham mumkin.

Har qanday moddani qanday agregat holatda bo'lishidan qat'iy nazar ularni fizikaviy-ximiyaviy xossalarini, ayniqsa spektroskopik xossalarini bilish, ulardan amaliyotda to'g'ri foydalanishga olib keladi.

Bu esa o'z navbatida hurmatli prezidentimiz aytganlaridek tabiat in'om etgan xom-ashyolardan to'g'ri ilmiy asoslangan holda foydalanish iqtisodiy samaradorlikni oshiradi [1].

2010 yil 12 noyabr kuni hurmatli prezidentimiz I.A.Karimov O'zbekiston Respublikasi Oliy majlisi qonunchilik palatasi va senatining qo'shma maslisida "Mamlakatimizda demokratik islohotlarni ya'nada chuqurlashtirish va fuqorolik jamiyatini rivojlantirish kontseptsiyasi" mavzusida ma'ruza qildilar [2].

O'z ma'ruzalarida oltita yo'nalishni eng muhim ustuvor vazifalar sifatida belgilab berdilar. Bu yo'nalishlar quyidagi yo'nalishlardir.

1. Davlat hokimiyati va boshqaruvni demokratlashtirish
2. Sud-huquq tizimini isloh qilish
3. Axborot sohasini isloh qilish, axborot va so'z erkinligini ta'minlash
4. O'zbekistonda saylov huquqi erkinligini ta'minlash va saylov qonunchiligini rivojlantirish
5. Fuqarolik jamiyati institutlarini shakllantirish va rivojlantirish
6. Demokratik bozor islohotlarini va iqtisodiyotini liberallashtirishni yanada chuqurlashtirish

Oltinchi yo'nalishda raqobat to'g'risida to'xtaldi. Raqobatlasha oladigan har qanday mahsulot yoki shu mahsulotni ishlab chiqaruvchi ilmiy asoslangan bo'lsagina yoki uni ishlab chiqaruvchining ilmiy saviyasi yuqori darajada bo'lganligini bu mahsulot raqobatlasha olishi mumkin ekanligini anglash mumkin.

Hech bir zamonda hozirgi kundagi kabi iqtidorli yoshlarga keng yo'l ochilmagan. Bularning hammasi Mustaqilligimiz sharofatidir. Mustaqillik esa o'z

o'zidan qo'lga kiritilmagan. Bu borada Muhtaram Prezidentimizning "O'zbekiston Mustaqillikka erishish ostonasida" kitobi davlatimiz rahbarining ayni shu tarixiy davrdagi faoliyatiga bag'ishlangan. Halqimizning asriy orzusi bo'lgan milliy istiqlol mavzusiga oid fikr va qarashlari atroflicha o'z aksini topgan.

Vatan uchun, halqimizning tinchligi va farovonligi uchun chinakam fidoiylilik namunasi aks etgan. Asarni o'qigan sari jo'shib, to'lib ketasan va shunday insonlarga sodiq bo'lgini keladi. [3]

Kontsepsiya va Prezidentimizning boshqa asarlaridagi ko'rsatmalari O'zbekiston zaminida yashayotgan fizik, ximik, biolog, vrach, injener, iqtisodchi, moliyachi, talaba va hokazo, kim bo'lishdan qat'iy nazar hamma uchun dastrul amal bo'lib hizmat qiladi.

Bitiruv malakaviy ishining tuzilishi: Kirish, ikki bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlarni, 9 ta rasm, 3 ta jadvalni o'z ichiga olgan holda 50 sahifada bayon etilgan.

I Bob. Yorug'likning muhitlardan molekular sochilishi

1.1 Suyuqliklarda yorug'likning sochilishi, A.Eynshteyn nazariyasi

Sochilgan yorug'likning intensivligini Reley formulasidan hisoblasa va natijalarni gaz va suyuqlik uchun solishtirib ko'rilsa, suyuqliklarda yorug'lik sochilishi gazlarga nisbatan 1000 martalab ziyod bo'lishi kerak. Lekin tajriba bu raqamni taxminan 40-100 martaligini ko'rsatayapti. Bir xil massali gaz va suyuqlik olinsa, gaz 10 marta ziyod sochadi. Bir xil hajmdagi gaz va suyuqlik olinsa, suyuqlik 40-100 marta ziyod sochadi. Bu xil solishtirish shuni ko'rsatadiki suyuqliklarda turli zarralardan sochilgan yorug'lik interferensiyasi juda kuchli, shuning uchun suyuqliklarda har bir molekula hisobga olinganda tajribada nazariyaga nisbatan kichik chiqayapti. Suyuqliklarda sochilish nazariyasini Smoluxovskiyning zichlik fluktuatsiyasi tug'risidagi fikriga asoslanib Eynshteyn ishlab chiqdi.

Eynshteyn Smoluxovskiyni g'oyasiga asoslanib suyuqlikni uzluksiz muhit deb qarab termodinamikaning qonunlarini qo'llagan holda, suyuqliklarda yorug'lik sochilishining fenomenologik nazariyasini yaratadi. Bu nazariya suyuqlikning biron bir modeliga asoslanmagan, bunda faqat zichlik fluktuatsiyasi hisobga olinib orentatsiya fluktatsiyasi hisobga olinmagan. Molekulalarning issiqlik harakati zichlik fluktuatsiyasiga sabab bo'ladi. O'z navbatida bu fluktuatsiya dielektrik fluktuatsiyaga sabab bo'ladi.

$$\Delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\Delta\rho \quad (1.1)$$

$$\Delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial T}\Delta T \quad (1.2)$$

Bunga temperatura fluktuatsiyasi ham sabab bo'ladi. Ammo o'lchashlar shuni ko'rsatadiki temperatura fluktuatsiyasi sochilishning 0,1-1% ni tashkil etadi.[4]

Shunday sust ta'sir etganligi uchun ham bu fluktuatsiya hisobga olinmaydi. Eynshteyn nazariyasida faqat zichlik fluktuatsiyasi hisobga olinadi. Suyuqliklardan turli zarralardan sochilgan yorug'lik interferensiyasi juda kuchli. Shuning uchun suyuqliklarda sochilgan yorug'lik intensivligini har bir zarradan tarqalayotgan ikkilamchi to'lqin summasi deyish qiyin. Bu aytilganlardan ko'rinadiki, Reley nazariyasini suyuqliklar uchun qo'llab bo'lmaydi.

Optik jihatdan bir jinsli bo'lgan muhitda yorug'likning sochilishini ko'p vaqtlar tushuntirish imkoniyati bo'lmadi faqat 1908 yilga kelib Polyak olimi Smoluxovskiy kritik opolotsensiyani kiritik temperaturada zichlik fluktuatsiyasining keskin ortib ketishi bilan tushuntirdi. Ammo kritik nuqtadan uzoqda ham zichlik fluktuatsiyasi nolga teng bo'lmas ekan.

Bizga o'lchamlari yorug'lik uzunligidan juda kichik ammo o'zida ko'plab molekulani sig'iraoladigan elementar hajim berilgan bo'lsa bu hajmdagi $\Delta\rho$ fluktuatsiyasi izotermik siqiluvchanligiga to'g'ri proporsional

$$\Delta\rho^2 = \frac{3^2}{V} KT \left(-\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial\rho} \right) \delta \quad (1.3)$$

Hozirgi kunda yorug'likning ko'pgina yangi xususiyatlari ochilmoqda. Bunga quydagilarni misol qilishimiz mumkin.

Jismlar o'zlariga tushayotgan nurning bir qismini yutib qolgan qismini qaytargani uchun ko'rinish xususiyatiga egalar. Shuningdek havo kabi shaffof jismlar nurni o'zicha o'tkazib yuborgani uchun ba'zan ko'zimiz ularni ilg'amaydi. Qiziq, tabiatdagi rangli jismlarni ham ko'rinmas holga keltirish mumkinmi? Misol uchun odam. Nazariy jixatdan albatta, mumkin. Buning uchun tushuayotgan nur yutilmasdan, burib yuborilishi kerak, xalos. Qarabsizki, qarshingizdagi inson ko'zdan g'oyib bo'ladi.

Fanda bunday hodisani yaqin paytgacha amaliyotga joriy qilish imkonsiz deb hisoblab kelingan. Biroq oxirgi tadqiqotlar amalda ham jismni ko'rinmas qilish mumkinligi, to'g'rirog'i, ko'rinmas materiallar yasash imkoniyati borligini ko'rsatmoqda. Shunday materiallar bilan istalgan jismni o'rab qo'ysangiz, u ko'zdan yo'qoladi, o'rnida shaffof bo'shliq hosil bo'ladi. Ko'rinmaslik sirini kashf

etish borasidagi izlanishlarga qiziqish kun sayin ortib bormoqda. Bundan to'rt yil muqaddam Pentagon Massachusets texnologiya universitetiga «Ko'rinmas askar kiyim»ini ishlab chiqish uchun 50 mln dollar ajratgan edi. Yaqinda 22-26 oktabr kunlari Italiya (Rim) da ana shu va boshqa muammolarni echish ustida ishlayotgan olimlarning birinchi Halqaro yig'ini o'tkazildi. Yig'inda butun dunyodagi mamlakatlardan 500 ga yaqin olim 500 ta ma'ro'za bilan qatnashgan. Shu jumladan bizning mamlakatimizdan ham bitta olim qatnashgan. Samarqand Davlat universitetining professori Obloqul Quvondiqov. Konferensiya mavzusi «Metamateriallar-sun'iy elektromag-nit materiallarning optik va mikroto'lqin texnikasida qo'llanishi» deb nomlangan. Bu mavzu ustida juda ko'p fikr-mulohazalar mavjud.[5]

Zichlik fluktuatsiyasi. Kritik opolensensiyada kritik temperaturaga yaqin temperaturada va kritik temperaturaning o'zida $\Delta\rho$ oshib ketadi. Kritik temperaturadan uzoqroqda ham $\Delta\rho^2 \neq 0$ shu tengsizlik har qanday temperaturada ham zichlik fluktuatsiyasini borligini ko'rsatadi va bu yorug'lik sochilishiga sabab bo'ladi. Zichlik fluktuatsiyasining berilgan hajmdagi molekulalar soni bilan ham ifodalash mumkin. Shu elementar 1 hajmdagi molekulalarning o'rtacha sonini

$$N=N_1V \quad (1.4)$$

V - yelementar hajm, $N_1 - 1sm^3$ dagi molekulalar soni, N - shu hajmdagi molekulalar o'rtacha sonini chetlanishini ΔN deb olamiz.

$$\Delta N = \bar{N} - \bar{N} \quad (1.5)$$

Hisoblashlar ko'rsatadiki o'rtachadan og'ishning o'rtacha qiymati nol ekanini ko'rsatadi.

$$\Delta \bar{N} = N - \bar{N} = 0 \quad (1.6)$$

Lekin bu og'ishning o'rtacha kvadrati qiymati nolga teng emas.

$$(\Delta \bar{N}^2) = (N - \bar{N})^2 = \bar{N}^2 - 2\bar{N} \bar{N} + \bar{N}^2 = \bar{N}^2 - 2\bar{N}^2 + \bar{N}^2 = \bar{N}^2 - \bar{N}^2 = \bar{N}$$

$$(\overline{\Delta N})^2 = \overline{N^2} - \overline{N}^2 = \overline{N} \quad (1.7)$$

(1.7) ga zichlik fluktuatsiyasining molekular soni bo'yicha ifodasi deyiladi. Zichlik fluktuatsiyasi o'z navbatida dielektrik singdiruvchanlik fluktuatsiyasiga sabab bo'ladi. Bu fluktuatsiyasi optik jixatdan bir jinsli bo'lgan muhitda yorug'likning sochilishiga sabab bo'ladi. Cmolvovskiyning shu g'oyasi Eynshteyn tomonidan yorug'lik sochilishini nazariy tushuntirishga olib keldi.

A. Eynshteyn nazariyasi

Bizga izotrop molekulari gaz berilgan bo'lsin. Bundan biz elementar hajmni ajratib olamiz. Shu gazga qutblangan yorug'lik tushayotgan bo'lsin. Qutblangan yorug'lik ta'sirida molekular o'zgaruvchan dipol hosil bo'ladi.

$$R = R_0 \sin \omega t \quad (1.8)$$

bu o'zgaruvchan dipol o'zidan elektromagnit to'lqinlarni tarqata boshlaydi. Xuddi shunday elementar hajmdagi hamma dipollar ikkilamchi to'lqinlar chiqara boshlaydi va bu to'lqinlarning zichlik fluktuatsiyasiga bog'liq bo'lgan qismi.

$$\Delta E_i = \frac{\omega^2}{c^2 r} \alpha \sin \theta \Delta N \quad (1.9)$$

ΔN molekular sonining o'rtacha qiymatidan og'ishi

$$\Delta E_i = \frac{\omega^2}{c^2 r} \alpha \rho = \alpha E \sin \theta \Delta N \quad (1.10)$$

Shu (1.10) ni elektrmaydon kuchlanganligining fluktuatsiyasini kvadratga ko'tarib o'rtacha qiymatni olsak, u vaqtda

$$\left(\overline{\Delta \sum_i R E_i} \right)^2 = I_0 \frac{\omega^4}{c^4 r^2} \alpha^2 \sin^2 \theta \quad (1.11)$$

$$I_0 = E_0^2 \sin^2 \omega t$$

$$E = E_0 \sin \omega t$$

$$\omega = 2\pi \frac{c}{\lambda} \quad \text{demak}$$

$$(\overline{\Delta N})^2 = \overline{N} = N_1 V$$

u vaqtda (1.11) ni qo'yidagicha yozish mumkin.

$$I = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V \sin^2 \theta \quad (1.12)$$

(1.12) ni hosil qilamiz.

Bu ifoda elementar hajmdan zichlik fluktuatsiyasi hisobiga sochilgan yorug'lik intensivligini beradi. Umumiy hajm uchun yozsak:

$$I = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V \sin^2 \theta \quad (1.12)$$

Bu Eynshteynning Reley formulasiga ekvalent bo'lgan formulasi. (1.13) ifoda.

Agar tabiiy yorug'lik tushayotgan bo'lsa

$$I = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V (1 + \cos^2 \varphi) \quad (1.13)$$

Lorents-Lorens formulasidan $\alpha = \frac{n^2 - 1}{4\pi N_1}$ yoki $\alpha = \frac{n - 1}{2\pi N_1}$

$$I = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \frac{(n-1)}{N_1} V (1 + \cos^2 \varphi) \quad (1.14)$$

Bu ifoda siyraklashgan gazlarga tabiiy yorug'lik tushganda sochilgan yorug'lik intensivligini harakterlovchi Eynshteyn formulasi.

Anizotrop molekulali gazlardan qutblangan yorug'likning sochilishi

Anizotrop molekulali gazlarda zichlik fluktuatsiyasidan tashqari anizotropiya fluktuatsiyasi ham yuz beradi. Bu fluktuatsiya ham yorug'likning sochilishiga sabab bo'ladi. Anizotrop molekulali gazga qutblangan yorug'lik tushsa unda hosil bo'lgan molekulalarning dipol momenti maydon bilan ustma-ust tushmaydi va o'zaro bir-biri bilan turli burchaklar hosil qiladi. Natijada ulardan chiqarilayotgan elektromagnit to'lqin kuzatish nuqtasiga turli burchaklar ostida borib etadi.[6]

X- o'qi bo'yicha qutblangan yorug'lik tushayotgan bo'lsa va uning elektr vektori Z-o'qi bo'yicha tebranayotgan bo'lsa, uning ta'sirida hosil bo'lgan o'zining dipol Z o'qidan boshqa burchakka og'gan bo'ladi, boshqa molekulalar bunga nisbatan boshqa burchaklarda qo'yilgan shuning uchun qutblanish asbobi

Nikol prizmasi yordamida ajratib olish mumkin. Bu erda ham kuzatish nuqtasiga dipoldan kelayotgan ikkilamchi to‘lqin kuchlanganligini shunday yozib olish mumkin.

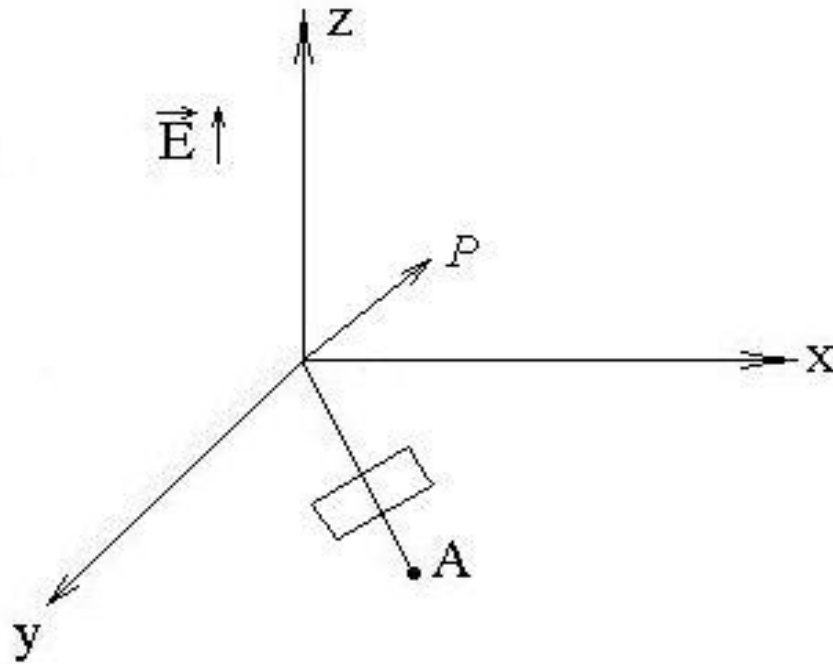
$$E^S = \frac{\omega^2}{c^2 r} \rho \sin \theta \quad (1.15)$$

Lekin boshqa molekulalarning chiqargan to‘lqinlarining kuchlanganligi turli burchaklar hosil qilgani uchun, kuzatish nuqtasiga keluvchi nurlardan keraklisini Nikol prizmasi yordamida ajratib olib, sochilishning tekisligiga perpendikulyar yoki parallel qutblangan nurlarni kuzatsa bo‘ladi. Shu polyarizatoridan o‘tgan yorug‘likning tebranish vektori bilan mos bo‘lgan \vec{q} birlik vektorini olamiz. Aynan shu vektorga parallel bo‘lgan elektr vektor kuchlanganligini olish uchun \vec{E} ning \vec{q} ga proyeksiyasini olish kerak.

Bu proyeksiyaning kattaligini topish uchun YE ning q bilan skalyar ko‘paytmasini olish kerak. Xuddi shunday operatsiyalar bajarib anizotrop molekulari gazlardan sochilgan yorug‘likning umumiy intensivligini qo‘yidagi formula bilan ifodalash mumkin.

$$I_q = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 \cos^2 \theta + \frac{2}{30} j^2 + \frac{2}{90} J^2 \cos^2 \theta \right) \quad (1.16)$$

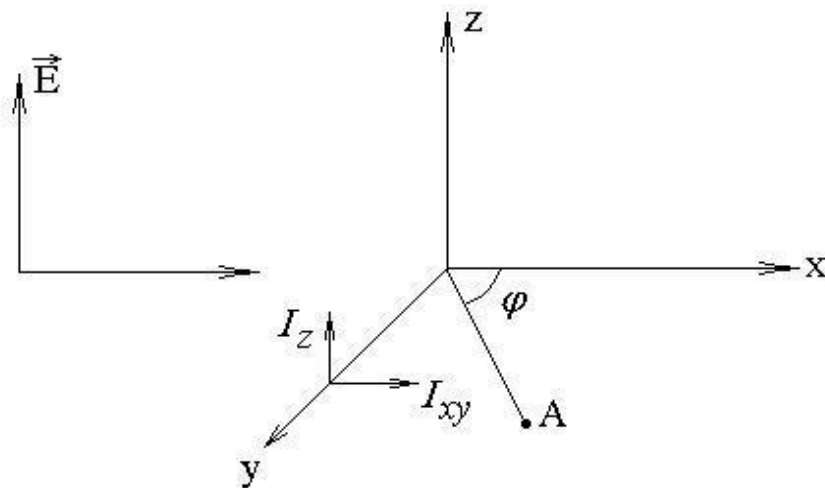
Bu ifodadagi intensivlikning birinchi hadi zichlik fluktuatsiyasi tufayli sochilgan yorug‘likning intensivligini beradi. (1.16) chi, (1.17) chi hadi anizotropiya hisobidan sochilgan yorug‘likning intensivligini beradi. Xuddi shunday (1.16) ifodadan foydalanib tabiiy yorug‘lik tushayotganda sochilgan yorug‘lik intensivligini hisoblab topish mumkin.



1.1-rasm.

Anzotrop molekuli gazlarda tabiiy yorug'likning sochilishi.

Tabiiy yorug'lik X-o'qi bo'yicha tushayapti deb faraz qilamiz rasmga qarang.



1.2-rasm

Bunday holda sochilgan yorug'lik intensivligini topish uchun uni ikki tekislikda qutblangan yorug'likdan iborat deb qaraymiz. Biri z-o'qi bo'yicha, ikkinchisi u- o'qi bo'yicha tebranayapti. O'tgan darsda aytganimizdek polyarizator yordamida x u- tekisligida tebranayotgan nurni ajratib olamiz bu nurni biz parallel nur deb $I_{||}=I_{xy}$ olamiz. z- o'qi bo'yicha tebranishni $I_{\perp}=I_z$ deb belgilaymiz.

$$I_{\perp} = I_Z = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{6}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \right) \quad (1.17)$$

parallel tashkil etuvchisi esa

$$I_{\parallel} = I_{xy} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 \cos \varphi + \frac{6}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \cos^2 \varphi \right) \quad (1.18)$$

umumiy intensivlik $I = I_{\parallel} + I_{\perp}$ ni topish uchun (1) bilan (2) qo'shamiz.

$$I = I_{\parallel} + I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left[\alpha^2 (1 + \cos^2 \varphi) + \frac{13}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \cos^2 \varphi \right] \quad (1.19)$$

(1.19) chi anizotrop molekulali gazlarga tabiiy yorug'lik tushganda sochilgan yorug'lik intensivligini beradi. Agar kuzatish tushuvchi yorug'likka nisbatan 90^0 burchak ostida bajarilayotgan bo'lsa $\varphi = 90^0$, $\cos \varphi = 0$. bo'ladi u holda I_{\parallel} va I_{\perp} tashkil etuvchilar

$$I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{7}{45} j^2 \right) \quad (1.20)$$

$$I_{\parallel} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \frac{6}{45} j^2 \quad (1.21)$$

(1.20) chi va (1.21) ifodalardan ko'rinadiki anizotrop gazlarga tabiiy nur tushayotganda 90^0 burchak ostida sochilgan yorug'lik to'lqin qutblanmagan balki qisman qutblangan bo'lar ekan. Bu nurning qutbsizlanish darajasi $\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}}$, bunga

(1.20) bilan (1.21) chini qo'ysak

$$\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = \frac{\frac{6}{45} j^2}{\alpha^2 + \frac{7}{45} j^2} \quad (1.22)$$

Bu ifoda sochilgan yorug'likning qutblanish darajasi, molekulaning qutblanuvchanligi, hamda optik anizotropiya orasidagi bog'lanishni beradi. (1.20) bilan (1.21) ning yigindisi tabiiy yorug'lik tushayotgan 90^0 burchak ostida sochilgan yorug'lik intensivligini beradi.

$$I_{90^0} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{13}{45} j^2 \right) \quad (1.23)$$

Birinchi qismi zichlik fluktuatsiyasi hisobidan ikkinchi qismi anizotropiya fluktuatsiyasi hisobidan sochilishini beradi. $\alpha = \frac{n-1}{2\pi N_1}$ ligini va $j^2 = 45\alpha^2 \frac{\Delta}{6-7\Delta}$

ligini hisobga olib, quyidagicha yozish mumkin:

$$I = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n-1}{N_1} \right)^2 V \left[(1 + \cos^2 \varphi) + \frac{45\Delta}{6-7\Delta} \cdot \left(\frac{13}{45} - \frac{1}{45} \cos^2 \varphi \right) \right] \quad (1.24)$$

Agar $\varphi = 90^\circ$ desak, u vaqtda

$$I_{90^\circ} = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \frac{(n-1)^2}{N_1} V \frac{6+6\Delta}{6-7\Delta} \quad (1.25)$$

$\frac{6+6\Delta}{6-7\Delta}$ ni birinchi bo'lib fransuz olimi Kaban aniqlagan shuning uchun ham

Kaban faktori deb yuritiladi. [7]

1.2 Vodorod bog‘lanish (H- bog‘lanish) va uning tabiati

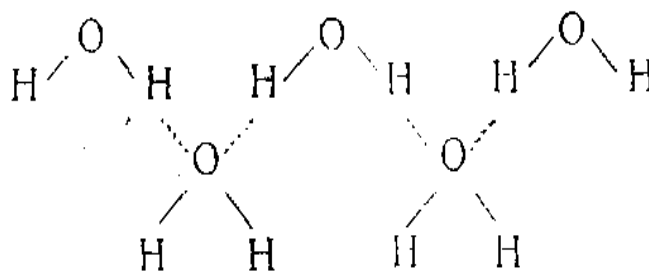
Yuqorida qurib o‘tilgan ion, kovalent va polyar bog‘lanishlar ximiyaviy bog‘lanishning asosiy turlaridir. Atom va molekular orasida, bu ximiyaviy bog‘lanishlardan tashqari, yana ximiyaviy emas ikkilamchi (qo‘shimcha) bog‘lanishlar ham bo‘ladi. Ular qatoriga vodorod bog‘lanish va Van-der-Vaals kuchlari kiradi.

Vodorod bog‘lanish haqidagi tasavvurlarni fanga dastlab rus olimlari N. N. Beketov (1877 yilda) va M. A. Ilinskiy (1887 yilda) kiritdilar. Vodorod bog‘lanishning mohiyati quyidagidan iborat: biror modda molekulasida fluor, kislorod (va kisman azot) kabi elektromanfiy elementlarning atomlari bilan birikkan bir valentli vodorod atomi yana boshqa fluor, kislorod (va qisman azot) atomlari bilan kuchsizroq bog‘lanish xususiyatiga ega. Masalan, suyuq holatdagi vodorod fluorining bir molekulasidagi vodorod atomi uning boshqa molekulasidagi fluor atomi bilan bog‘lanishi mumkin (vodorod bog‘lanish punktir chiziq bilan ko‘rsatilgan):



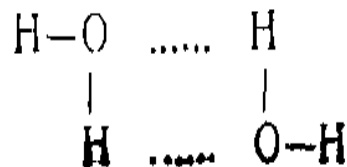
Bu yerda vodorod bir vaqtda fluorning ikki atomi bilan bog‘langanligidan u HF ning ikki molekulasini bir-biri bilan bog‘laydi va yirikroq zarracha H_2F_2 ni hosil qiladi.

Ikkinchi misol tarikasida suyuq holatdagi suvni olaylik. Suvda ham bir molekuladagi vodorod atomi ikkinchi molekuladagi kislorod atomi bilan qo‘shimcha bog‘langan:

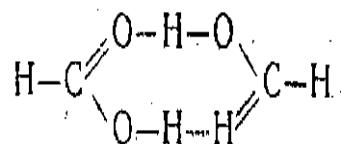


Buning natijasida, suv molekulari bir-biri bilan bog‘lanib, yirikroq zarrachalarni hosil qiladi. Ularni $(\text{H}_2\text{O})_x$ formula bilan ko‘rsatish mumkin (bu

yerda $x=2, 3, 4$ va hokazo bo'lishi mumkin). Bu zarrachalar ichida eng barqarori $(N_2O)_2$ dir. $(N_2O)_2$ ning "struktura" formulasi quyidagicha yozilsa bo'ladi:



Suyuqliklarda ko'p tarqalgan assotsiatsiya (modda molekularining o'zaro birikib, yirikroq zarracha hosil qilish) xodisasining sababi vodorod bog'lanishdir deb tushuntirish mumkin. Masalan, chumoli kislota NSOON ning assotsilangan molekularini quyidagicha tasvirlay olamiz:



Vodorod bog'lanishning kelib chiqishi vodorod atomining tabiatiga bog'liq, vodorod atomi o'zining bir elektronini yo'qotganda vodorod atomi yadrosiga aylanadi. Vodorod ionining elektron qavati bo'lmagani uchun boshqa ionlarning elektronlari uning yaqinlashishiga qarshilik qilmaydi. Shy sababli vodorod ionini boshqa atomlarning elektron qavatiga yaqinlashadi va ichiga kira oladi.[8]

Vodorod bog'lanishning mustahkamligi uncha katta emas. Umuman, ximiyaviy bog'lanish mustahkamligi shu bog'lanishni tamomila uzish uchun kerak bo'ladigan energiya bilan o'lchanadi. Bu energiya bog'lanish energiyasi nomi bilan yuritilib, bir gramm-molekula moddaga tug'ri keladigan kkal hisobida o'lchanadi. Ximiyaviy bog'lanish asosiy turlarining mustahkamligi 20 — 200 kkal/mol ga teng (kovalent bog'lanish ion bog'lanishga qaraganda mustahkamroq bo'ladi); vodorod bog'lanishning mustahkamligi 5 — 8 kkal/mol Van-der-Vaals bog'lanishi esa 0,02 — 2 kkal/mol ga tengdir.

1. Atomlarning atomlar, molekular va ionlar bilan, molekularning molekular va ionlar bilan, ionlarning ionlar va atomlar bilan birikish xodisasi ximiyaviy bog'lanish deb ataladi. Ximiyaviy bog'lanish atom, molekula va nonlardagi elektronlarning harakati tufayli vujudga keladi. Ximiyaviy bog'lanish

asosan quyidagi ko‘rinishlarda bo‘ladi: ionli bog‘lanish; kovalent bog‘lanish; metall bog‘lanish; koordinativ bog‘lanish; vodorod bog‘lanish; molekulalararo bog‘lanish.

2. Ionli bog‘lanish o‘zaro reaksiyaga kirishayotgan bir modda atomlaridan elektronlar ikkinchi modda atomlariga ko‘chib o‘tishi natijasida hosil bo‘ladigan manfiy va musbat zaryadli ionlarning bir-biriga ta’siri tufayli vujudga keladi. D. I. Mendeleev jadvalidagi bosh gruppacha va yonaki gruppacha elementlari hosil qiladigan ionlar uch sinfga bo‘linadi: I — sirtqi qavatida 8 ta elektroni bo‘lgan ionlar, II — sirtqi kavatidagi elektronlar soni 8 bilan 18 orasida bo‘lgan, ya’ni tugallanmagan sirtqi elektron qavatga ega bo‘lgan ionlar va III — sirtqi qavatida 18 ta elektroni bo‘lgan ionlar. I sinfdan III sinfga o‘tishda, albatta, ionlarning zaryadlari bir xil va radiuslari bir-birinikiga yaqin bo‘lganda, ionlarning barqarorligi kamayib boradi.

3. Kovalent bog‘lanish ikki atom orasida elektron juftlar hosil bo‘lishi tufayli vujudga keladi. Kovalent bog‘lanish vujudga kelganda o‘zaro ta’sir etuvchi atomlarning elektron bulutlari bir-birini maksimal bekitadi, ya’ni bir-birining ichiga kiradi; buning natijasida atomlar orasidagi elektronlar bulutining zichligi ortadi. Elektron bulutlarning bekitilishi atomlararo eng yaqin masofa bo‘ylab amalga oshsa, bunday kovalent bog‘lanish σ bog‘lanish nomi bilan yuritiladi. Karrali bog‘lar hosil bo‘lganda σ bog‘lar tekisligiga tik tekisliklardagi elektron bulutlarining bekitilishi natijasida π bog‘lanish vujudga keladi.

4. Ximiyaviy bog‘lanish xarakteri o‘zaro birikuvchi elementlarning nisbiy elektromanfiyliklari ayirmasiga bog‘liq bo‘ladi; agar bu ayirma katta bulsa,

5. elementlar o‘zaro ionli bog‘lanish hosil qiladi; agar bu ayirma juda kichik bo‘lsa, kovalent bog‘lanish vujudga keladi; ayirma uncha katta bulmasa, polyar bog‘lanish vujudga keladi.

6. Ximiyaviy bog‘lanish mustaxkamligi shu bog‘lanishni tamomila uzish uchun kerak bo‘ladigan energiya bilan o‘lchanadi. Bu energiya bog‘lanish

energiyasi deyilib, kkal/mol bilan ifodalanadi. Ximiyaviy bog‘lanish asosiy turlarining mustahkamligi 20 — 200 kkal/mol; vodorod bog‘lanishning mustahkamligi 5 — 8 kkal/mol, molekulalararo bog‘lanish mustahkamligi 0,02 — 2 kkal/mol dir.

1.3 Kombinatsion sochilishi vsa uning kvant nazariyasi

Reley sochilishida sochilgan yorug'lik chastotasi tushuvchi yorug'lik chastotasiga mos keladi. Sochilishning bunday turini birinchi bo'lib Reley aniqlagani uchun bunday sochilish Reley sochilishi deb yuritiladi. Bu sochilish kogerent tarzda yuz beradi. Shu sababli ham Reley sochilishi – yorug'likning kogerent sochilishidir (1.3-rasm,a). Biroq sinchiklab o'tkazilgan tekshirishning ko'rsatishicha, sochilgan yorug'lik spektrida tushayotgan yorug'lik xarakterlaydigan chiziqlardan tashqari qo'shimcha chiziqlar (yo'ldoshlar) borligi bular tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida turishi ma'lum bo'ldi.

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.

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

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

- Yo'ldoshlar uyg'otuvchi chiziqdan ikki tomonda simmetrik yotuvchi chiziqlarning ikki sistemasidan iborat, (4-rasm) ya'ni

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

Bu yerda chapda uyg'otuvchi chastotalardan uzunroq to'liqinli tomonda joylashgan yo'ldoshlarning chastotalarini, o'ngda esa uyg'otuvchi chastotalardan ikkinchi tomonda yotgan yo'ldoshlarning chastotalarini bildiradi. Spektrning qizil qismiga yaqin joylashgan va shuning uchun «qizil» yo'ldoshlar deb ataladigan birinchi yo'ldoshlar «binafsha» yo'ldoshlardan ancha intensivdir (1.3-rasm)

•Temperatura ko'tarilganda «binafsha» yo'ldoshlarning intensivligi tez ortadi. Kombinatsion sochilishni birinchi bo'lib G.S.Landsberg va L.I.Mandelshtamlar hamda hind olimlari Raman va Krishnanlar kashf etishgan (1928 yil). Hind olimlari Nobel mukofotiga sazovor bo'lishgan. Chet el adabiyotlarida Raman effekti deb ham yuritiladi. Bu sochilish odatda kombinatsion sochilish deyiladi. Quyida kombinatsion sochilish bilan batafsilroq tanishamiz.[9]

Yorug'likni kombinatsion sochilishining mumtoz nazariyasi

Kombinatsion sochilish hodisasi klassik nazariya nuqtai nazaridan quyidagicha tushuntiriladi. Ushbu hodisada yo'ldoshlarning paydo bo'lish sabablari yorug'lik to'lqinini sochuvchi muhit molekulasini atomlarining past chastotali tebranishlari bilan modulyatsiyalanishi orqali tushuntirish mumkin. Molekulaning qutblanishi, umuman qaraganda uni tashkil qilgan atomlarning joylashishiga bog'liq. Atomlar tebranganda qutblanish (α_0 - o'rtacha qiymat atrofida tebranadi) buni quyidagicha izohlash mumkin:

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

Ushbu tebranishlarning chastotasi 10^{12} - 10^{13} gts bo'lib, elektromagnit to'lqinlar shkalasining infraqizil spektri sohasiga to'g'ri keladi. Boshqacha aytganda. $\alpha(t)$ kattalikni o'zgarishi tushayotgan yorug'likning ($\approx 10^{15}$ gts) elektr maydonining tebranishiga nisbatan sekinroq o'zgaradi. Shu sababga ko'ra ham tushayotgan yorug'lik to'lqinining monoxromatik maydonida molekulaning dipol momentini o'zgarishi:

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

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'zgaruchan elektr maydoni, E_0 yorug'lik to'lqini elektr maydoni kuchlanganligini amplitudasi. $\omega = 2\pi\nu$ - tushayotgan yorug'likning burchak chastotasi, α - molekulaning qutblanuvchanligi, faqat uning tuzilishi va xossasiga bog'liq bo'lgan doimiy.

Bu jarayonda sochilgan yorug'lik maydon kuchlanganligining tebranishi ham modulyatsiyalanadi. Bu tebranishlarning eltuvchi chastotasi tushayotgan yorug'lik

to'liqlinining chastotasi ω ga teng, modulyatsiya esa ω_i - chastotalarida (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 boladi. Boshqa so'z bilan aytganda sochilgan yorug'likning spektri shu molekula haqida axborot beradi. Bu spektrni o'rganish va tahlil etish orqali molekula strukturasi va tuzilishini bilishga muvoffaq bo'lamiz.[9,10,11]

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

$$I_\nu = \frac{16\pi^4\nu^4}{3c^2} \alpha^2 E_0^2 \quad (1.21)$$

ga teng bo'lgan monoxromatik nur chiqaradi.

$\alpha \neq const$ hol uchun, ya'ni sochuvchi muhit molekulasiining qutblanuvchanligi o'zgaruvchan bolsa u holda molekulaning dipol momenti ham vaqt bo'yicha o'zgaradi. Umuman, molekula qutblanuvchanligi 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 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, mumtoz elektrodinamika sochilgan yorug'lik spektrida siljimagan chiziqning (ν) har ikki tomonida ν_i - masofaga simmetrik siljigan chiziqlar – yo'ldoshlarning paydo bo'lishini to'g'ri tushuntirib beradi va ularning intensivligi

$$I_{S,A} = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_R^{S,A})^4 \alpha^4 E_0^2 = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_0 \mp \nu_i)^4 \alpha^4 E_0^2 \quad (1.22)$$

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

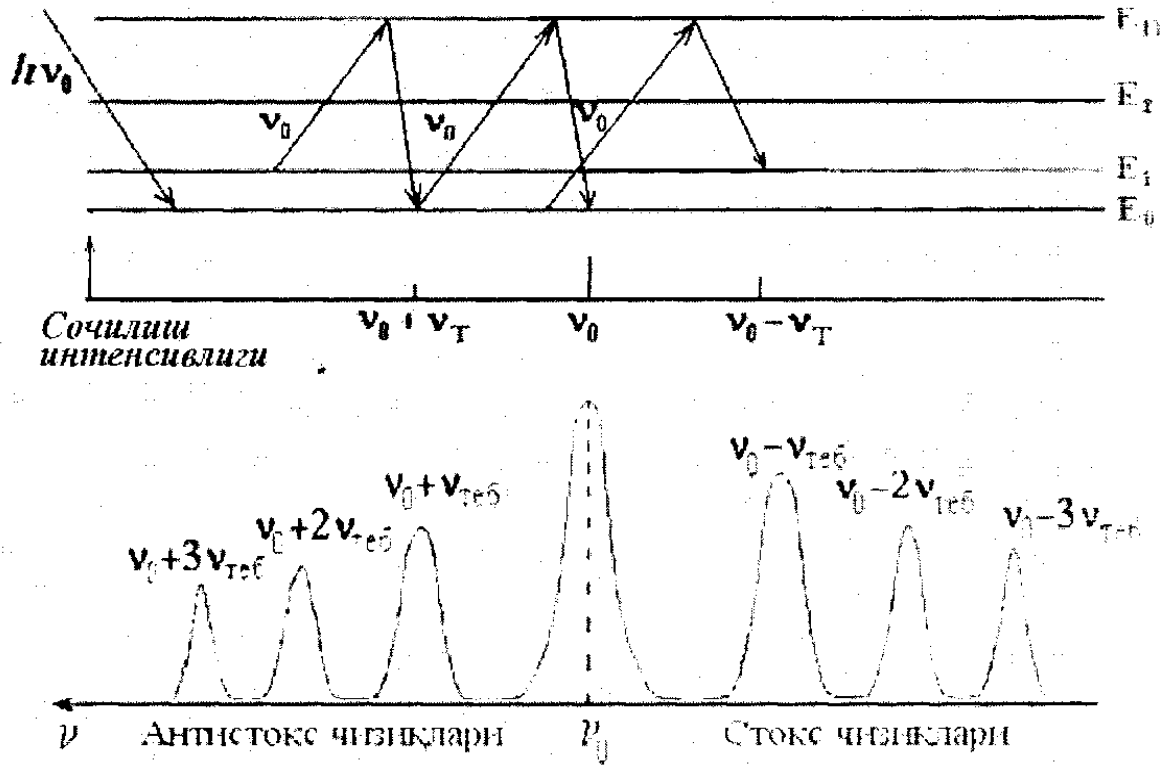
Mumtoz elektrodinamika nuqtai nazaridan stoks va antistoks chiziqlarining intensivligi teng ekanligi kelib chiqadi. Eksperiment natijalaridan yaxshi bilamizki, ushbu chiziqlarning (yo'ldoshlarning) intensivligi teng emas, jumladan qizil yo'ldoshlar - stoks chiziqlarining intensivligi binafsha yo'ldoshlarning intensivligidan yuqori ekanligini ko'rsatadi. Mumtoz fizika qizil va binafsha 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. [12,13]

Yorug'likni kombinatsion sochilishini kvant nazariyasi

Yorug'lik kvantlari to'g'risidagi soddalashtirilgan tasavvurdan foydalanib, kombinatsion sochilish hodisasining mohiyatini anglab etish mumkin. Kvant tasavvurlariga asosan, ν_0 chastotali yorug'lik ma'lum bir ulushlar (kvantlar) tarzida tarqalib, bularning miqdori $h\nu_0$ ga teng bu erda $h=6,62\cdot 10^{-34}$ J·s - Plank taklif etgan universal doimiydir. Shuning uchun o'zida ν_0 chastotali tebranishlar bo'layotgan atom $h\nu_0$ energiya zahirasiga ega bo'ladi. Bu energiyani atom o'shanday chastotali yorug'lik tarzida chiqarishi mumkin. Bu nuqtai nazardan yorug'likning molekullarda sochilishini yorug'lik kvantlarining (ya'ni fotonlarning) molekullalar bilan to'qnashishi deb qarash mumkin. Bu to'qnashish natijasida fotonlar uchish yo'nalishini o'zgartiradi. Fotonlar bilan molekullalar o'rtasidagi to'qnashishlar elastik va noelastik bo'ladi. To'qnashish elastik to'qnashish bo'lgan holda molekulaning energiyasi va fotonning ν_0 chastotasi o'zgarmaydi, bu hol Reley sochilishiga mos keladi (4-rasm). Releycha sochilish paytida sochilgan yorug'lik kvantlarining chastotasi muhitga tushayotgan yorug'lik kvantlarning chastotalariga mos keladi. Shuning uchun ham Releycha sochilishga elastik sochilish ham deyiladi.

To'qnashish noelastik bo'lgan holda fotonning energiyasi $h\nu_i$ tebranma kvant miqdorida o'zgaradi. Agar yorug'lik tebranish holatida bo'lmagan molekula bilan o'zaro ta'sir qilsa, 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 erda ν_0 o'yg'otuvchi yorug'lik chastotasi, ν_i molekula tebranishlarining chastotasi. [15,16,17]



1.3-rasm. Reley (ν_0) va kombatsion ($\nu_0 - \nu_{teb}$ va $\nu_0 + \nu_{teb}$) sochilish spektrlarini hosil bo'lishiga olib keladigan energetik sathlar orasidagi o'tishlar.

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 1.1-rasmdan osongina tushunish mumkin. Yuqorida aytilganlardan kelib chiqib kombinatsion sochilishga quyidagicha 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. [14,15]

Tebranish holatida bo'lgan molekular soni o'yg'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:

$$\frac{I_{T1}}{I_{T2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{hv}{KT_2}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{hv}{KT_1}}\right)} \quad (1.23)$$

Bundan ko'rinadiki, stoks chiziqlarining intensivligi temperaturaga teskari proporsional ekan. Antistoks chiziqlarini esa temperaturaga to'g'ri proporsional bo'ladi:

$$\frac{I_{T1}}{I_{T2}} = \frac{e^{-\frac{hv}{KT_1}}}{e^{-\frac{hv}{KT_2}}} \quad (1.24)$$

Stoks va antistoks chiziqlarining intensivliklari nisbati:

$$\frac{I_{as}}{I_s} = \left(\frac{v_0 + v_{teb}}{v_0 - v_{teb}}\right)^4 \quad (1.25)$$

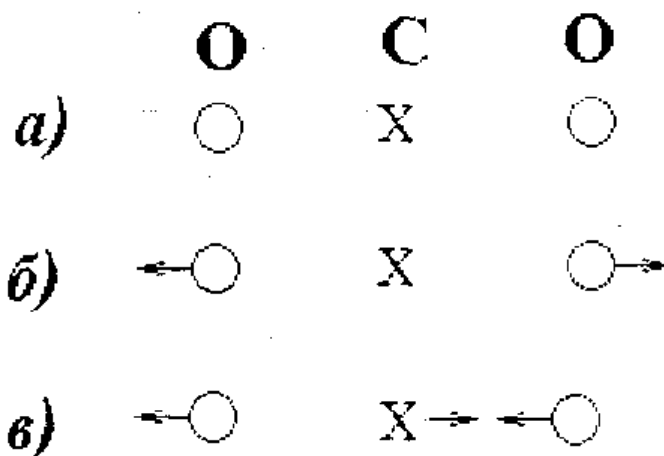
kabi bo'lib, bundan ko'rinadiki chastotaning to'rtinchi darajasiga proporsional ekan.

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

Infraqizil spektrida aktiv bo'lgan tebranishlar kombinatsion sochilish spektrida aktiv bo'lmaydi va aksincha.

Masalan: CO₂ molekulasida atomlar tebranganda (1.4-rasm, б) ulaming joylashishi shunday o'zgaradiki, bunda molekulaning qutblanuvchanligi ko'p o'zgarib, uning elektr momenti o'zgarmaydi, chunki kislorodning bir xil ishorali

zaryadlangan ikki atomi (O) tebranish vaqtida uglerod zaryadidan ikki tarafga simmetrik joylashganicha qolaveradi.



1.4-rasm. CO₂ molekulasida atomlar tebranishining xillari. *a* - atomlarning dastlabki vaziyati; *б*- qutblanuvchanlikni o'zgartiradigan tebranish; *в* - elektr momentini o'zgartiradigan tebranishi.

Boshqacha tebranishda (1.4-rasm, в) qutblanuvchanlik o'zgarmaydi, chunki kislorod atomlaridan biri uglerodga yaqinlashganda ikkinchisi uzoqlashadi va aksincha; biroq bu tebranishlarda molekulaning elektr momenti o'zgaradi.

Shuning uchun birinchi tur tebranishda (1.4-rasm, б) kombinatsion sochilish chizig'i paydo bo'ladi, bu chiziqning chastotasini kombinatsion sochilish spektridan aniqlash mumkin; ikkinchi tur tebranishda (1.4-rasm, в) chastotani infraqizil, polosasining vaziyatiga qarab topish mumkin.[18,19]

Kombinatsion sochilish usuli moddaning molekulyar tuzilishini tadqiq etishning muhim usuli hisoblanadi. Molekula tebranishlarining xususiy chastotalari bu usul yordamida osongina aniqlanadi; bu usul molekula simmetriyasining xarakteri molekulalar ichida ta'sir qiladigan kuchlarning kattaligi va umuman

molekulyar dinamikaning o'ziga xos tomonlari to'g'risida fikr yuritishga imkon beradi.

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

Yuqorida gap dastlabki nurlanishning muhit molekulalari bilan o'zaro ta'sir qilishda paydo bo'ladigan kombinatsion sochilish to'g'risida bordi. Yorug'likni atom yoki ionlar sochib yuborganda ham shunga o'xshash hodisa yuz beradi. Masalaning mohiyatiga tushunib yetish uchun atom holdagi gazlarda yorug'likning yutilishi va dispersiyasini o'rganish natijalarini esga olish kerak bo'ladi. Atomni ossillyatorlar to'plami deb qarash mumkin; bu ossillyatorlarning xususiy chastotalari atomning ixtiyoriy ikki kvant holatidagi energiyalari ayirmasi bilan aniqlanadi. Shuning uchun atomlar bilan molekulalar o'rtasidagi farq faqat ossillyatorlar tabiatida bo'ladi: molekula bo'lgan holda ossillyatorlar yadrolar harakatini tavsiflaydi, atomlar holda esa ossillyatorlar elektronlar harakatini tavsiflaydi. Bu o'xshashlikni nazarda tutib, yuqorida yuritilgan mulohazalarni mumtoz modulyatsion manzara nuqtai nazaridan ham soddalashtirilgan kvant sxema nuqtai nazaridan ham endi atomiarga nisbatan takrorlash mumkin. [20,21]

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

Yorug'likning kombinatsion sochilishi hodisasini mumtoz fizika doirasida turib tushuntirib berish mumkin, lekin uning kvant talqini yorug'likni kvant tabiatini mohiyatan tasdiqlaydi.

Molekulalar strukturasi, ichki molekulalar va molekulararo kuchlarini o'rganishda, murakkab aralashmalarni tahlil qilish va u yoki bu birikmalarni identifikatsiyalash (ajratish) da kombinatsion sochilish usuli muhim anjomdir.

1.4 Molekulalararo o'zaro ta'sir tabiati

Agar jismlar bir agregat holatdan ikkinchi agregat holatga o'tsa (masalan gazdan suyuqlikka) uning nafaqat fizika-ximiyaviy xususiyatlari balki spektroskopiyasi ham o'zgaradi. YA'ni spektrlarning intensivliklari formasi dipolyarizatsiya koeffitsiyenti, chastotasi o'zgaradi. Bu o'zgarishlar molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari bilan bog'langandir. Quyidagi jadvalda moddalarning infraqizil yutilish spektrida gaz holatiga nisbatan, suyuq holatida chastotalarning siljishi ko'rsatilgan.

Molekula	Eritma	$\Delta\nu(\text{sm}^{-1})$ spektrning siljishi
HF	CCl_4	-110
HCl	CCl_4	-55
DCI	CCl_4	-41
HBr	CCl_4	-40
HI	CCl_4	-26

Bugunki kunda molekulalararo o'zaro ta'sir spektroskopiyasiga tegishli bo'lgan bir nechta qonunlar topilgan. Bu qonuniyatlar molekulalararo o'zaro ta'sir spektroskopiyasining bosh masalasini beradi. Bosh masala ikkiga bo'linadi.

1. Spektroskopik eksperimentlar natijalariga qarab molekulalarning xususiyatlari haqida ma'lumot olish.

2. Eksperimental natijalarga qarab ichki maydonning molekulaning spektroskopik xususiyatlariga ta'siri haqida ma'lumotlar olish mumkin.

Bu masalalarni yechishda molekulaning o'ziga tegishli bo'lgan spektri emas, (aylanma, tebranma, elektron) balki bu spektrlarning o'zgarishi katta ahamiyatga ega.

Molekulalararo o'zaro ta'sir spektroskopiyasining ba'zi tomonlarini ko'rishdan oldin, molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini klassifikatsiya qilish muhimdir. Molekulalar orasidagi kuchlar asosan ikkiga bo'linadi.

1. Universal ta'sir kuchlari.
2. Spetsifik ta'sir kuchlar .

Universal o'zaro ta'sir deganimizda hamma holatlarda namoyon bo'ladigan kuchlar, bu kuchlarga Van-der-Vals kuchlari ham deyiladi.

Bu kuch tabiatini uzoq vaqtlar tushuntirish qiyin bo'ldi. Qachonki atomlar orasidagi ta'sir kuchi tabiatini to'lig'icha o'rganilganidan so'ng, molekulalar orasidagi ta'sir kuchlari to'g'risida to'liq xulosaga kelishi mumkin.

Odatda molekulalararo ta'sir kuchining energiyasi 0,5-1,5 kal/mol tashkil etadi.

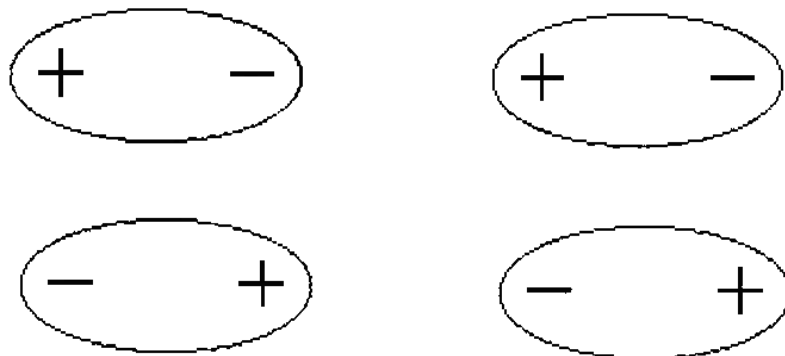
Van-der-Vals kuchlari 3 xil bo'ladi.

1. Oriyentatsion kuch
2. Induksion kuch
3. Dispersion kuch

Bu kuchlar tabiatiga alohida to'xtalib o'tamiz.

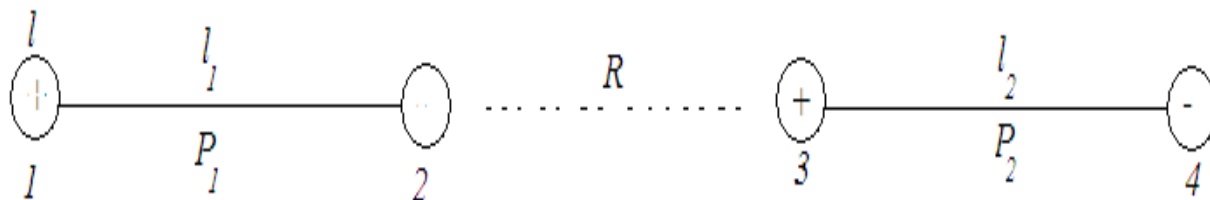
1. Oriyentatsion kuch

Agar elektr maydoni $E=0$ bo'lganda ham dipol momentiga ega bo'lgan molekulaga qutblangan molekula deyiladi. Bu kuch xuddi shunday doimiy dipol momentiga ega bo'lgan molekulalar orasida vujudga keladi. Qutblangan molekulalar bir-biriga nisbatan ma'lum tartibda joylashadi, ya'ni qarama-qarshi ishorali qutblarining joylanish tartibi quyidagi vaziyatda bo'ladi.



1.5 rasm.

Natijada qarama –qarshi ishorali qutblar orasida elektrostatik kuch paydo bo'ladi. Shu tufayli molekulalar bir-birini tortadi. Dipollar orasidagi bunday kuchga oriyentatsion kuch deyiladi. Faraz qilaylik bizga ikkita dipol berilgan bo'lsin.



Bu dipollar oasidagi masofa $R \gg \ell$ qanoatlantirsa bu sistemaning umumiy ta'sir energiyasi har bir zaryadlarning ta'sir energiyalaridan iboratdir, ya'ni

$$U = U_{1,3} + U_{1,4} + U_{2,3} + U_{2,4} =$$

$$= \frac{P_1 P_2}{\ell_1 \ell_2} \left[\frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} - \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 + \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} \right] \quad (1.26)$$

Agar 1- tenglikda $R_1=R_2$ hamda $\ell_1 = \ell_2$ deb olsak u holda

$$U = \frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} + \frac{1}{R} \right] = -\frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{2}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} \right] \quad (1.27)$$

1-va 2- tenglikka odiy matematik almashtirishlar kiritib va $R \gg \ell$ ekanligini hisobga olsak oriyentatsion ta'sir energiyasi quyidagiga teng bo'ladi.

$$U_{op} = -\frac{2P^2}{R^3} \quad (1.28)$$

3-tenglikni chiqarishda biz molekulaning issiqlik harakatini hisobga olmadik. Bizga ma'lumki molekulaning issiqlik harakati uning orentatsiyasiga ta'sir etadi. Shunga mos ravishda uning orentatsion energiyasiga ham ma'lum miqdorda o'zgartirish olib keladi. Shuni hisobga olib oriyentatsion ta'sir energiyasini hisoblab chiqamiz. Buning uchun qutblanuvchanligi α ga teng bo'lgan sistemani maydon kuchi YE bo'lgan elektr maydoniga kiritamiz. Bu holda ta'siri natijasida sistemada induksion dipol momenti R^1 sistemaning potensial energiyasi bilan quyidagicha bog'langan.

$$U = P^1 E \cos(P^1 E) \quad (1.29)$$

Dipol maydon tomonidan induksiyalangani uchun uning yo'nalishi maydon yo'nalishiga mos tushadi.

$$\text{Sos}(P^1 E) = 1 \quad (1.30)$$

bo'ladi.

Bu holda maydon kuchlanganligining qiymati $O \div E$ ga o'zgaradi. Natijada oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymati quyidagiga teng bo'ladi.

$$U_{id} = -\int_0^E P^1 dE = -\int_0^E \alpha E dE = -\frac{\alpha E^2}{2} \quad (1.31)$$

6- tenglikdagi maydon kuchlanganligining qiymatini hisoblasak bu maydonning qiymati + va - zaryadlar hosil qilgan maydonlar yig'indisidan iborat bo'ladi, ya'ni

$$E = \frac{\ell}{R^2} - \frac{\ell}{R^2 - 2R\ell} = \frac{2e\ell R}{R^4 - 2R^3\ell} = \frac{2PR}{R^4 - 2R^3\ell} = \frac{2P}{R^3} \quad (1.32)$$

$R \gg \ell$ e'tiborga olsak

$$E = \frac{2P^2}{R^3}$$

Oriyentatsion ta'sirda qutblanuvchanlik rolini oriyentatsion o'ynaydi va uning qiymati quyidagiga tengdir.

$$\alpha = \frac{P^2}{3KT} \quad (1.33)$$

7- va 8- tenglamalarni 6-ga qo'ysak biz oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymatini topgan bo'lamiz.

$$U_{op} = -\frac{P^2}{3KT} \cdot \frac{4P^2}{R^6} = \frac{4P^4}{6KTR^6}$$

$$U_{op} = -\frac{2}{3KT} \cdot \frac{P^4}{R^6} \quad (1.34)$$

Oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymatini xarakterlaydi, temperatura oshishi bilan kamayadi. (9) dan ko'rinadiki oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymati temperaturaga hamda R^6 ga teskari proporsional bo'lib, dipol momenti R^2 ga to'g'ri proporsional.

Agar ta'sir etuvchi dipollarning dipol momenti o'zaro teng bo'lmasa ya'ni, $R_1 \neq R_2$ (9) quyidagicha bo'ladi.

$$U_{op} = -\frac{2}{3KT} \cdot \frac{P_1^2 P_2^2}{R^6}$$

(-) minus ishorasi ikkita dipolning o‘zaro ta‘sirini xarakterlaydi.

2. Induksion kuch

Bir-biriga yaqin joylashgan qutbli molekula bilan ya‘ni xususiy dipol momentiga ega bo‘lgan molekula bilan qutbsiz molekula orasidagi ta‘sir kuchi induksion kuch bilan xarakterlanadi.

Bunday molekula bir-biriga yaqinlashganda qutbsiz molekula qutbli molekula ta‘siri ostida qutblanadi. Natijada ikkinchi ya‘ni qutblanmagan molekulada induksion dipol momenti vujudga keladi va induksion dipol momenti qutblangan molekula bilan tortishadi. Har bir dipol momentiga ega bo‘lgan molekula o‘z yo‘nalishi bo‘yicha qo‘shni dipol momentiga ega bo‘lmagan molekulalarni induksiyalaydi. Shuning uchun ham induksion ta‘sir energiyani quyidagicha yozish mumkin.

$$U_{ina} = -\frac{2\alpha P^2}{R^6} \quad (1.35)$$



Maydon ta‘sisiz



Maydon ta‘siri ostida

Induksion kuchni birinchi bo‘lib Debay tekshirgan.

3. Dispersion kuch

Bu kuch ikkita qutblanmagan molekulalar orasidagi ta‘sirni xarakterlaydi. Agar bu kuch bo‘lmaganda edi yuqori bosimda va past temperaturada gazlarni

suyuqlikka aylantirib bo‘lmas edi. Bunday kuch tabiatini faqatgina kvant mexanikasi asosida tushuntirish mumkin. Bizga kvant mexanikasidan ma’lumki ikkita atom ta’sir qilib molekula hosil qiladigan atomlarni kvant sistemasi yoki boshqacha aytganda atomlardagi elektronlarning muvozanat holatida tebranishi garmonik tebranish hosil qiladi deb qarash mumkin, bunday tebranish hosil qiluvchi sistemaga ossillyator deyiladi.

Atom va molekularning o‘rtacha dipol momenti nolga teng bo‘lganda elektronlarning tebranishi tufayli hosil bo‘lgan ossillyatorning dipol momentining aniq qiymati noldan farqli bo‘ladi. Shu tufayli ossillyatorlar o‘zaro ta’sir etishadi. Atom va molekularlardagi vaqtning ma’lum bir paytida vujudga keladigan dipolga fluktatsion dipol momenti deyiladi.

$$U_{duc} = \frac{3h\nu_0\alpha^3}{4R^6} \qquad U_{um} = \frac{m}{R^{12}}$$

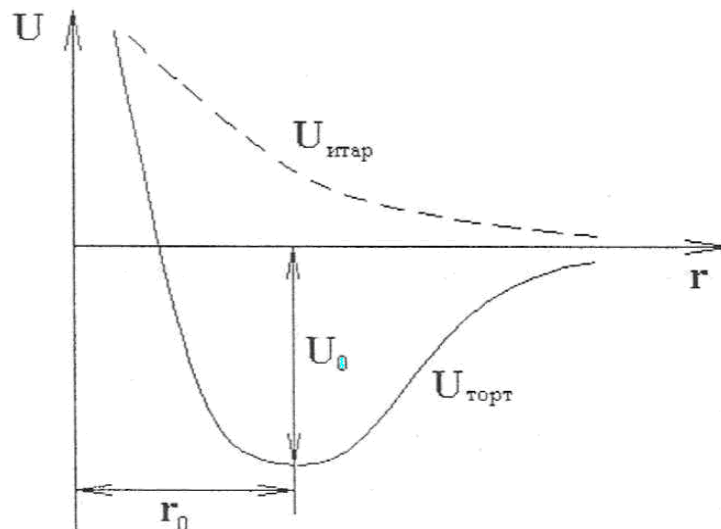
m - itarishish kuchlarining doimiyliigi deyiladi.

$$U = -U_{mopm} + U_{um}$$

$U = -\left(\frac{n}{R^6}\right) + \left(\frac{m}{R^{12}}\right)$ bu formulaga Lenard-Djons formulasi deyiladi.

Bu formulaning grafigi quyidagi ko‘rinishga ega.

Yuqoridagi formulalardan ko‘rinadiki universal ta’sir kuchlarining hammasi masofaning R^6 darajasiga teskari proporsional. Oriyentatsion ta’sir kuchlari temperaturaga ham bog‘liq.



1.6 – rasm

Quyidagi jadvalda ba'zi moddalar uchun oriyentatsion, induksion, dispersion kuchlarning ulushlari keltirilgan.

Molekula	O'zaro ta'sir			
	Oriyentatsion	Induksion	Dispersion	μ, D
HCl	18,6	5,4	105	1,03
HBr	6,2	4,05	176	0,78
H ₂ O	190	10	47	1,8
NH ₃	84	10	93	1,5
HI	0,35	1,68	388	0,38

Jadvaldan ko'rinadiki dipol momenti katta bo'lgan joyda dispersion o'zaro ta'sirining ulushi ko'proq bo'ladi. Spetsifik kuchlar faqatgina ba'zi suyuqliklarga va ba'zi molekulalarga xos bo'lgan kuchlar hisoblanadi.

II Bob. Tajribalar texnikasi va metodikasi

2.1 Tajriba o'tkazadigan qurilma va uning ishlash usuli

DFS-52 spektrometri lazer manbai yordamida yoritilgan suyuq kristall, polikristall moddalarda kombinatsion sochilish spektrini olish va qayd qilish uchun mo'ljalangan. Shuningdek bu spektrometr molekulyar spektroskopiya oblastida fizika-ximiyaviy tekshirishlar yani suyuqliklar, suv aralashmalari kristallar plyonkalar va kraskalar tarkibi va tuzilishini o'rganishda ishlatilishi mumkin.

Spektrometrning tarkibi. Spektrometrning tarkibiga aralastiruvchi difraksion panjarali qo'shaloq monoxramator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi, chastometr va hisoblash qo'shaloq monoxramatordan qurilmasiga ega bo'lgan elektiron qayd qiluvchi qurilma ERU-53 termoelektrik sovutgich blok pitasiyasi ,alfavit raqamli va yozuvchi qurilma 15 IPG -32-003 da kiruvchilar laboratoriya o'zi yozuvchi asbob LKS 4-003 ulash kabellari o'tkazgichlari kompakti aralastirish va ehtiyot qismlari kiradi.

Ishlash prinsipi.

Tekshirilayotgan namunali monoxramator yorug'lik bilan nurlantiriladiganda sochilgan yorug'likning spektrida chiziqlar kuzatiladi. Bu chiziqlarning chastotasi namunaga tushayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasi kombinatsiyasidan iborat bo'ladi.

DFS-52 spektrometrda uyg'otuvchi manba sifatida seriyali laxerlar ishlatiladi spektrni tekshirish uchun yorug'lik kam sochuvchi dieraksion panjarali foydalanadi. Spektrni qayd qilish sovitib turiladigan foto elektron ko'paytirgich yordamida amalga oshiriladi.

Hisoblash qurilmasi spektrlarning ketma ketligi qayd qilishini olingan natijalarning matematik qayta ishlashni va natijalarni qayd qiluvchi asbobga chiqarishni taminlaydi.

Optik sxemasi.

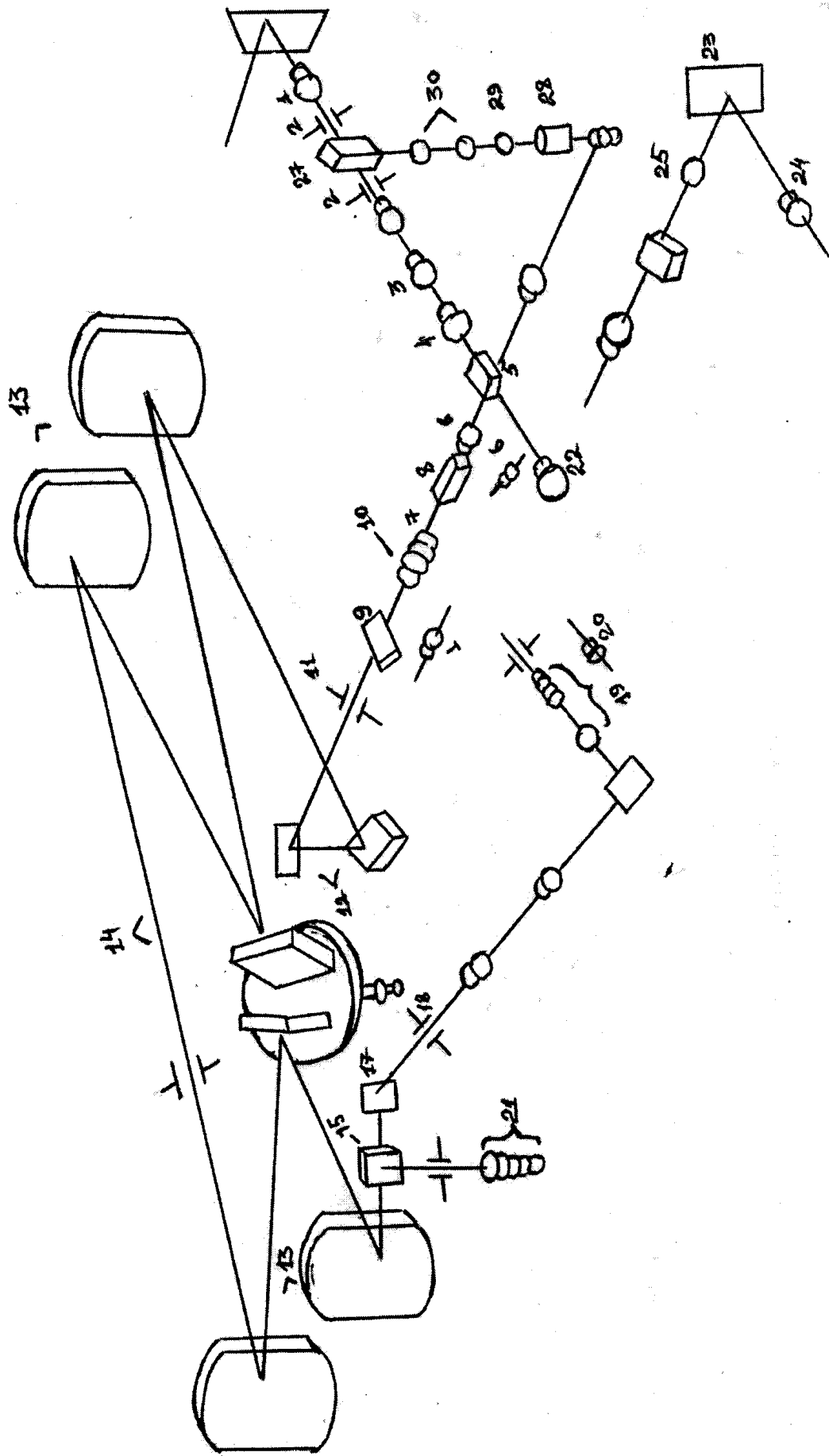
Spektrometrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qoshaloq monoxromator va qabul qiluvchi qurilma elementlaridan iborat. Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishini ta'minlaydi, namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qo'shaloq monoxromatorning kirish tirqishiga yo'naltiradi.

Qo'shaloq ko'zguni monoxromator almashtiruvchi difraksion panjaraga ega bo'lib, u uyg'otuvchidan 20 sm^{-1} masofada 8 dan 25 sm^{-1} mm gacha teskari chiziqli dispersiyani ta'minlaydi (sochilgan nur uyg'otuvchining 10" qismi (intensivlikning) dan katta bo'lganda).

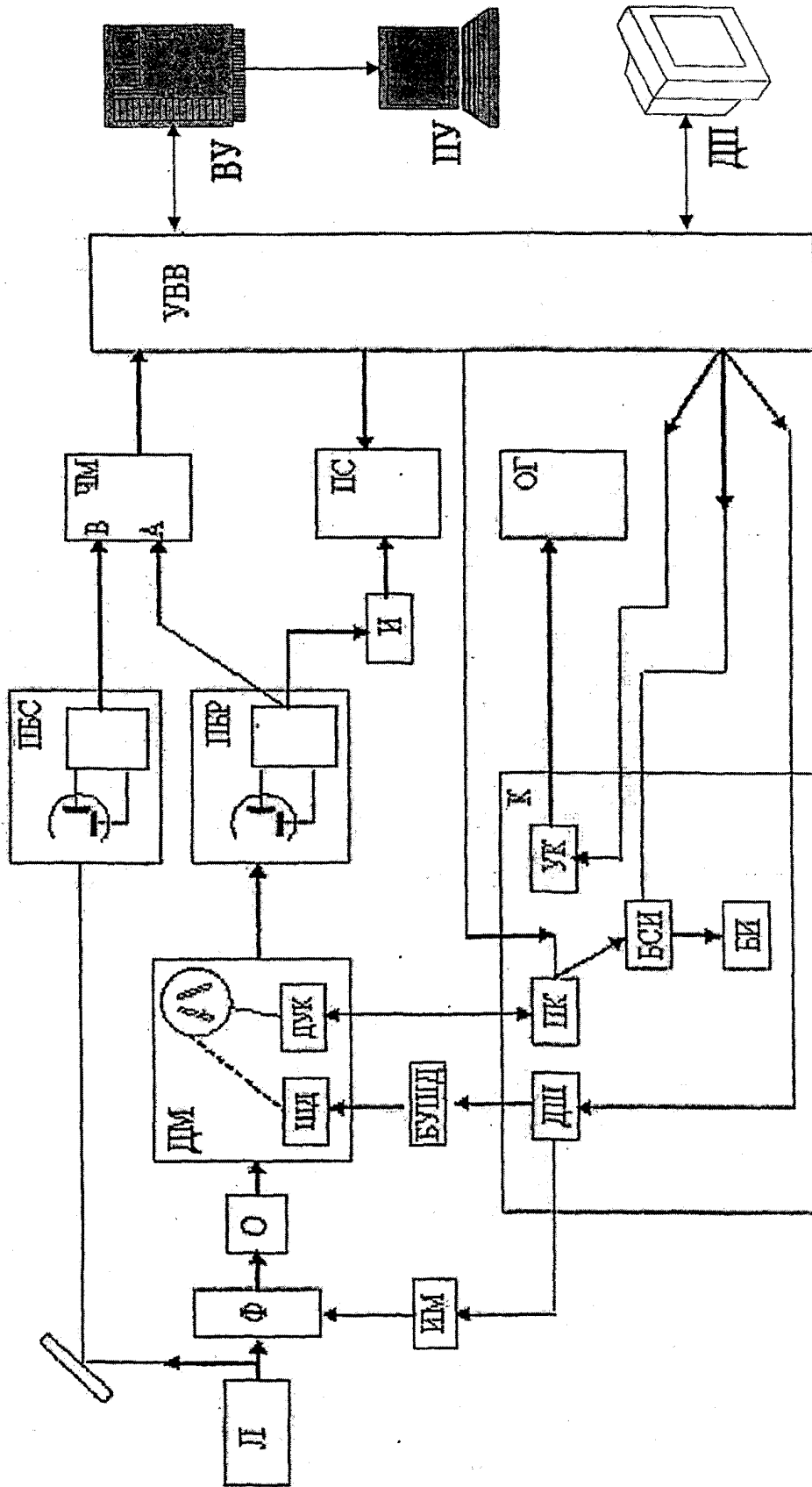
Qabul qilish blokining qayd qilish kanaliga o'rnatilgan ob'ektiv fotoelektron ko'paytirgichning qabul qilish maydonida monoxromator qora chizig'ining tasvirini beradi. Qabul qilish bloki taqqoslash kanalining oldiga o'rnatilgan yorug'lik o'tkazgich lazer nurlanishning bir qismini uzatadi. [22,23]

Qo'shaloq monoxromatorning optik sxemasi va ishlatilishi.

Yoritish sistemasi va qabul qilish bloki bo'lgan qo'shaloq monoxromator yorug'likning kombinatsion sochilishi uchun, spektrni olish va uni elektr signallariga aylantirish uchun mo'ljallangan.



2.1-rasm. DFS-52 spektrometrining optik sxemasi



2.2-расм. DFS – 52 спектрометрия функционал схемаси

Spektrometrning optik sxemasi 2.1-rasmda keltirilgan. Yorug'lik manbaidan chiqqan parallel nurlar dastasi tor yo'lni interferension yorug'lik filtrida 1, diafragmadan 2, qutblovchi plastinkadan 3 va almashtiriluvchi ob'ektivlardan 4 biri orqali namuna 5 tekisligiga fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish linzalardan biri orqali proeksiyalovchi sistemada to'plahadi va parallel dasta bo'lib ob'ektivdga 7 yo'naladi. Linza va ob'ektiv 7 da iborat proeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qo'shaloq monoxromatorning kirish tirqishi oldida, 2.3 yoki 3.5 marta kattalashtirib beradi. Linza bilan ob'ektiv 7 orasida parallel nurlar dastasiga prizma-analizator 8 qo'yilishi mumkin. Monoxromatorning orqasiga ikkita yassi beruvchi ko'zgudan iborat sistema 12 qo'yilgan. Bu sistema yorug'likdastasini buradi. Monoxromatorning ob'ektiva 13 sifatida parabolasiimon ko'zgular ishlatiladi. Difraksion panjaralar 14 almashtirilishi mumkin. To'lqin uzunligining 400-600 nm diapozonidan 1 mm dan 1000 ta chizig'i bo'lgan panjaralar ishlatiladi. Chiqishdagi buravchi ko'zgu 15 difraksiyalangan yorug'likni chiqish tirqishiga 16 yo'naltiriladi, 15 ko'zguni yorug'lik dastasidan buruvchi ko'zgu 17 yorug'likni chiqish tirqishining emmitatoriga 18 yo'naltiriladi. Bu esa spektrning chiqarilgan oblastini okulyar 20 li ko'rish trubasi orqali kuzatish mumkin. Qabul qilingan blokka o'rnatilgan ob'ektiv 21 asbobning qorachig'ini fotoelektron ko'paytirgichning katodiga $1/20$ kattalashtirishda akslantiradi. Lazerning yorug'lik dastasida to'la foydalanish maqsadida yoritish sistemasida shaffof moddalar bilan ishlaganda sferik ko'zgu 22 qo'yiladi. Bu esa lazer nurining moddadadan qayta o'tishini ta'minlaydi. Ko'zgu 23 yorug'lik dastasining namunadan kuzatish yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalishida sochilgan qismidan foydalanishni 9 ta'minlaydi.

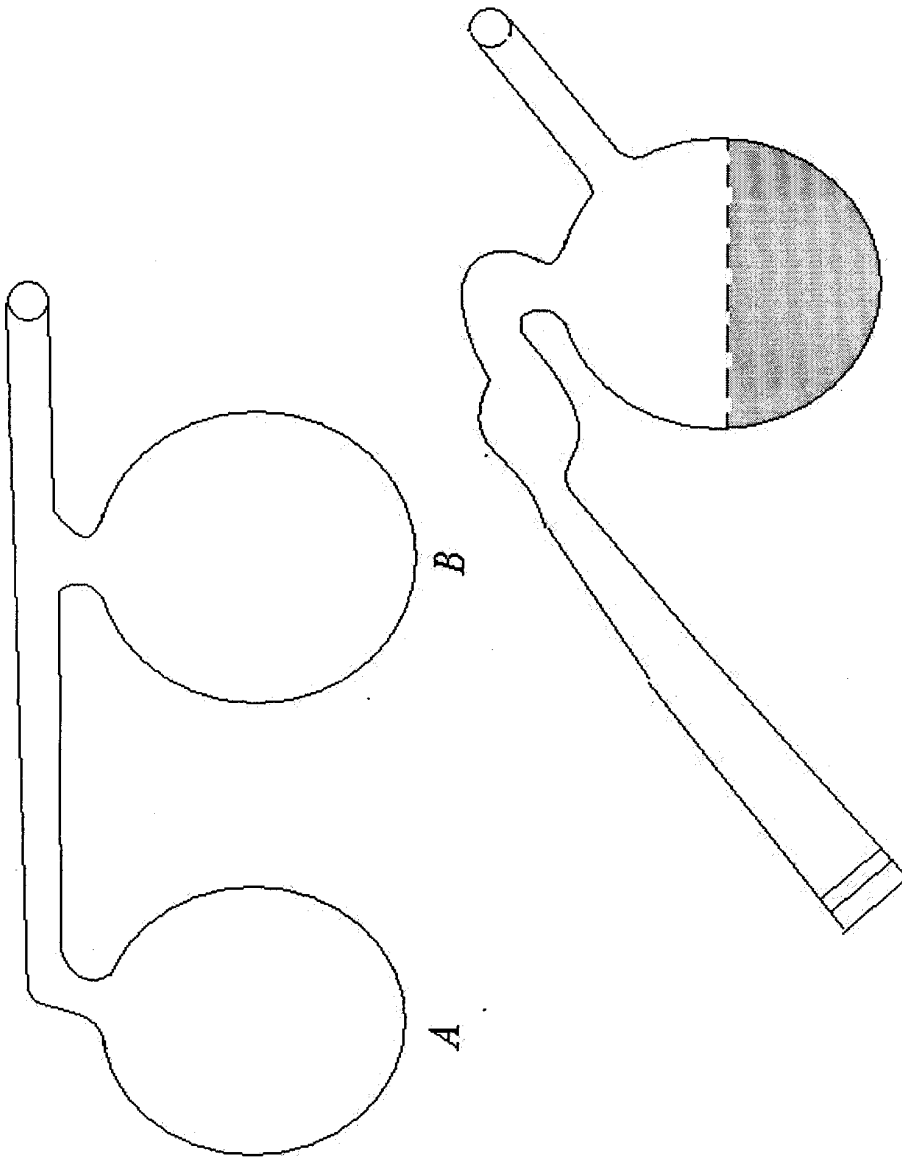
Namunalar bilan ishlash uchun beruvchi prizma 25 va qisqa fokusli linza 26 ishlatiladi. Bular lazer nurini kukun yoki suyuqlik uchun mo'ljallangan idishga proeksiyalaydi. Plastinka 27 lazer nurini 28 ko'rinishga uzatadi. Yorug'likning o'tkazgich orqali nurlanishi taqqoslash qabul qulivchisiga uzatiladi [23,24,25].

2.2 O'rganilayotgan obektlarni tajribaga tayyorlash

Obyektlarni tajribaga tayyorlash uchun o'sha tekshirilayotgan namuna toza bo'lishi kerak, ya'ni chang va boshqa aralashmalardan holi bo'lishi kerak. O'zgina aralashma ham molekulalar sochilishidan chetlanishidan olib kelishi mumkin. Tekshirilayotgan modda ximiyaviy tarkibi jihatdan ham tozalangan bo'lishi kerak. Tozalash vakuum ostida qatta haydash dan iborat bo'lib ikkita bir-biriga ulangan sharikdan iborat.

Eng avval moddani tozalashdan oldin shariklar va Vud trubkasi distirlangan suv bilan toza qilib spirt bilan chayilgandan so'ng kiritish shkafida quritilgan. Tekshirilayotgan modda bir-biriga ulangan shariklardan biri Vud trubkasiga ulanadi. Ulangandan keyin shariklardan biri ya'ni tekshirilayotgan modda solingan sharik pechga solinadi va ma'lum qaynash temperaturasigacha qizdiriladi. Natijada qizdirilayotgan sharikdagi modda solingan tarkibidagi moddaning tarkibidan chetlasha boshlaydi. Ya'ni o'rganilayotgan obekt bug'lanib shariklardan biriga o'tib ketadi eksperimentga tayyorlangan moddani shu yo'l aynanbir necha marta tozalanadi va nihoyat o'zi alohida toza holida qoladi.

A- sharikda suyuqlik qo'yilib ugli kislota yordamida yoki quruq tuz yordamida yaxlatilib havosi so'rib olinadi. Vakuum qilingandan so'ng O nuqtasi kavsharlanib va pechkaga quyilib qayta haydaladi. B sharik qayta haydalgan suyuqlik bilan kesib olinib Vud trubkasiga ulanadi. Vud trubkasiga ulangandan keyin qayta haydash yo'li bilan tozalanadi. So'ng B nuqtadan Vud trubkasining tag qismi bilan yonbosh qismlaridan tashqari hamma tomoni bo'ladi. Bundan maqsad boshqa tomonlarga sochilgan yorug'lik turlicha yutilishi uchun yuqorida aytilganidek Vud trubkasi eksperimentga tayyor hisoblanadi.



2.3- - Rasm Vud trubkasi

2.4. Olingan natijalar va ularning tahlili

O'rganilayotgan moddani eksperimentga tayyorlash va aynan shu molekulaga tegishli spektrni olish uchun o'rganilayotgan namunaga quyidagi talablar qo'yiladi.

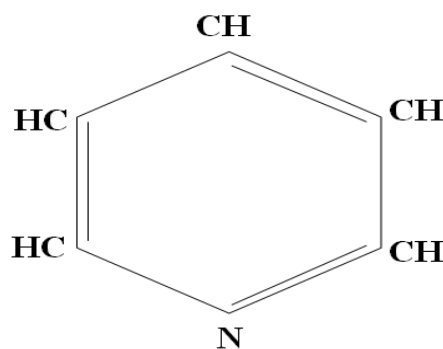
a) molekulaga tegishli bo'lmagan sochilishni kamaytirish uchun xizmat qiluvchi chang zarralaridan modda toza bo'lishi kerak.

b) modda fluorestsensiya bermaydigan bo'lishi kerak.

v) modda iloji boricha rangsiz bo'lishi kerak. Hamma tekshiriladigan moddalar «XU» yoki «УДА» markada olingan keyin qo'shimcha tozalangan bo'lishi kerak.

Qo'shimcha tozalash uchun uni vakuum orqali bir necha marotaba qayta haydash tufayli amalga oshiriladi. Suyuqlikni haydash uchun idish eng oldin sulfat kislota aralashmasi yoki spirt bilan yuviladi. O'rganilayotgan obyekt shu topilgan ikkita shar shaklidagi shisha kolbaga quyiladi. So'ng karbonat kislota yordamida yaxlatiladi va vakuum nasos yordamida havosi surib olinadi. Shundan so'ng kolba kavsharlanadi va suyuqlik qaynash haroratiga etguncha qizdiriladi va bug'lanib ikkinchi sharikka o'tkaziladi, chayqab yana qaytarib birinchi sharikka o'tkaziladi. Bu jarayon kamida uch marta takrorlanadi. Bu tozalangan suyuqlik Vud trubkasiga solinadi. Bajarilgan ishlarning so'ngida trubka qora rangga bo'yaladi, faqatgina yorug'lik tushishi chiqishi va sochilishi uchun tirqishlar qo'yiladi. [26,27]

Tekshirilayotgan moddalarning ximiyaviy formulasi va strukturasi tuzilishi quyidagi keltirilgan.



Piridin C_5H_5N

O'rganilayot gan modda	Zichligi g/sm ³	Molyar massasi, (g/mol)	Qaynash temperaturasi °C	Suyuqlanish temperaturasi °C	Molekulyar formulasi
Piridin	0.982	79,10	115,6	-42	C ₅ H ₅ N

Suyuqliklar va ularning aralashmalari oziq-ovqat boshqa sanoat tarmoqlarda, shuningdik inson organizmlarning faoliyatda muhim o'rin egallaydi. Shuning uchun suyuqliklarni o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir. Shu maqsadda biz suyuqliklardan piridin molekulasini misolida kvantokimyoviy hisoblashlar o'tkazdik.

Olti a'zoli geterosiklik modda bo'lib, suvda eriydigan, badbo'y hidli 115 °C da qaynovchi suyuqlik. Piridin molekulasining tuzulishi benzolning tuzulishiga uxshash bo'lib piridin yuqori dipol' momenti 2,2D ga ega. Piridinni toshko'mir chirkidan, suyaklar pirolizidan hosil bo'lgan suyak yog'idan olinadi. Uni sintez yo'li bilan ham olinadi. Piridin xuddi aminlar kabi asosli xossalarga ega. Piridin benzolga o'xshab, almashinish reaksiyalarida ishtirok etadi, lekin bu jarayon deyarli qiyinlik bilan boradi. Piridin o'zagi PP vitamin molekulasini tarkibiga kiradi, bu modda sizga biologiya kursidan belgilari ma'lum bolgan teri kasalligi pellagraning rivojlanishiga yo'l qo'ymaydi. Piridin o'zagi bizga tanish sulfidin nomli dori tarkibiga ham kiradi.

Tadqiqot ishimizdan maqsad, piridin molekulasining monomer va dimeri uchun molekularning o'zaro oriyentatsiyasi, bog' uzunliklari, zaryadlar taqsimlanishi, dimer hosil bo'lish energiyalarini aniqlashdan iborat. [28]

Kvantokimyoviy hisoblashlar Gaussian-98 dasturida B3LYP yaqinlashishda 6-31G (d,p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi.

Ushbu ishni Samarqand davlat universiteti Optika va spektroskopiya kafedrasida qoshidagi "Molekulyar spektroskopiya" nomidagi muammolar laboratoriyasi xodimlari ishlari bilan birga o'tkazdik.

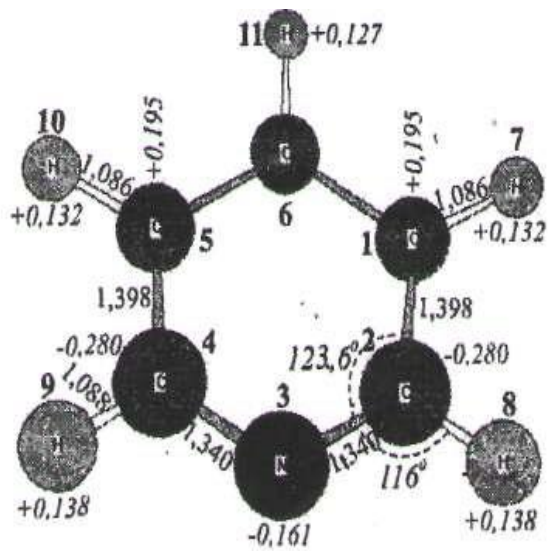
Laboratoriya xodimlari kombinatsion sochilish spektrlari yordamida piridin eritmalarida assotsiatlarga tegishli spektral chizigi bo'yicha ko'plab ilmiy izlanishlar olib borgan va bu chiziqlarning murakkabligi to'g'risida fikr yuritgan.

1 a-rasmda piridin molekulasining monomeri keltirilgan, rasmdan ko'rinib turibdiki, hamma vodorod atomlari musbat zaryadlangan bo'lib, bunda H^{δ} va H^{θ} atomlar zaryadlari eng katta, azot atomi esa manfiy zaryadlangan. $H^{\delta}C^2N^{\theta}$ va

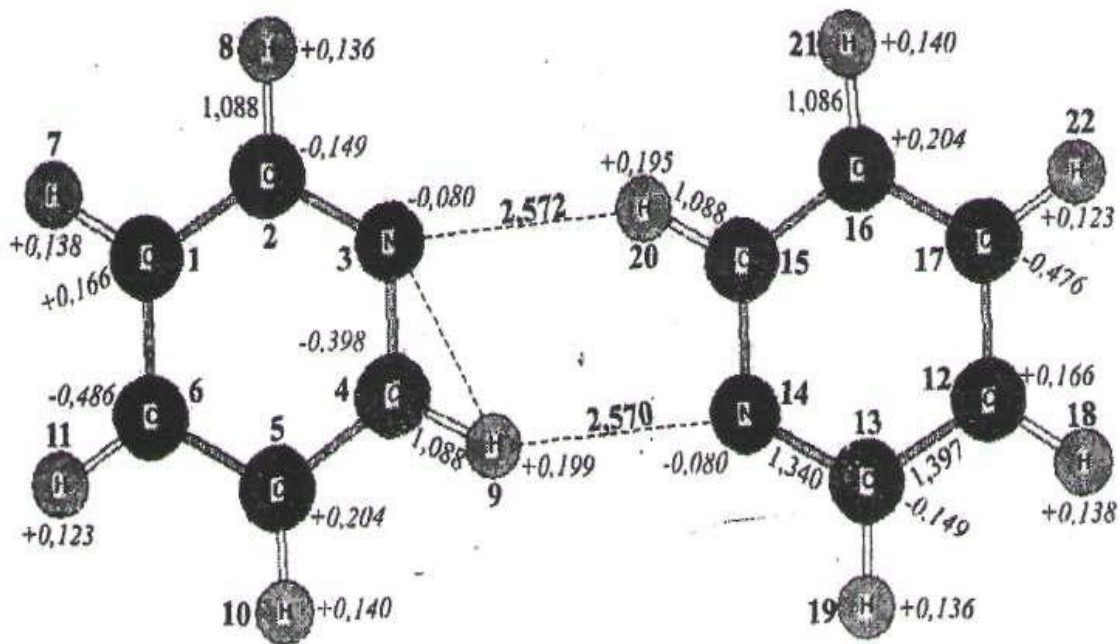
$H^9C^4N^3$ atomlar orasidagi burchaklar 116° ga teng bo'lsa, $C^1C^2H^8$ va $H^9C^4C^5$ atomlar orasidagi burchak $120,3^\circ$ ga tengdir.

1-b-rasmda ikkita piridin molekulasining dimer keltirilgan. Hisoblashlar ikkita piridin molekulasini o'rtasida o'zaro vodorod bog'lanish mavjud bo'lishini ko'rsatdi. Birinchi vodorod bog'lanish birinchi piridin molekulasining $9H$ atomi bilan ikkinchi piridin molekulasining $14N$ atomi orasida vujudga kelib, bu bog' uzunligi $2,570 \text{ \AA}$ ni tashkil etadi. Ikkinchi vodorod bog'lanish birinchi piridin molekulasining $3N$ atomi bilan ikkinchi piridin molekulasining $20H$ atomi orasida vujudga keladi, bu bog' uzunligi $2,572 \text{ \AA}$ ga teng. Dimer hosil bo'lish energiyasi $1,75 \text{ kkal/mol}$ ni tashkil etadi.

Xulosa qilib aytadigan bo'lsak, hisoblashlar piridin molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilgan ekan. Bunday dimer hosil bo'lishi tajriba natijalari bilan mos tushmoqda. [29]



a)



b)

2.4-rasm. a) piridin monameri, b) piridin dimeri.

Xulosa

1. BMIning kirish qismida ishning dolzarbligi, maqsadi va vazifalari va amaliy ahamiyati yoritildi.
2. Birinchi bob nazariy qism bo'lib, mavzuga tegishli adabiyotlardan foydalanib nazariy ma'lumotlar o'rganildi va tahlil qilindi.
3. Olingan natijalarni yaxshi tushuntirish uchun Gaussian-98 dasturiida B3LYP yaqinlashishda 6-31G (d,p) gaus funksiyasi asosida kvantokimyoviy hisoblashlar o'tkazildi.
4. Piridinda hamma vodorod atomlari musbat zaryadlangan azot esa manfiy zaryadlangan ekan. $H^8C^4H^9$ va $H^9C^4N^3$ atomlari orasidagi burchaklar 116° ga teng.
5. Hisoblashlarni ko'rsatishiga piridinning ikkita molekulasi o'rtasida vodorod bo'g'lanish mavjud. Birinchi bog' 9H va 14N azot o'rtasida mavjud bo'lib bog' uzunligi $2,570 \text{ \AA}$ ni tashkil etadi. Ikkinchi bog' esa 3N va 20H atomi orasida sodir bo'ladi. Bu bog'ning uzunligi esa $2,572 \text{ \AA}$ ga teng ekan.
Dimer hosil bo'lish energiyasi $1,75 \text{ kkal/mol}$ ga tengligi aniqlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Karimov I.A. “Jahon moliyaviy-iqtisodiy inqirozi, O’zbekiston sharoitida uni bartaraf etishning yo’llari va choralari” Toshkent-“O’zbekiston”-2009 y.
2. Karimov I.A. “Mamlakatimizda demokratik islohotlarni yanada chuqurlashtirish va fuqorolik jamiyatini rivojlantirish kontseptsiyasi” 12-noyabr 2010 y.
3. Karimov I.A. “O’zbekiston mustaqillikka erishish ostonasida” Toshkent. “O’zbekiston” -2011 y.
4. Qo’uliyev V.T. “Optika” T.2009 y.
5. Герцберг Г.“Спектры и строение двухатомных молекул” М.1949 г.
6. Герцберг Г.“Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул” М. 1979 г.
7. Майер Г.Г.“Электронные спектры многоатомных молекул” Л. 1969 г.
8. Чулановский В.М.“Введение молекулярного спектрального анализа” М.Л.1951 г.
9. Вахшиев G.L.“Введение в молекулярная спектроскопия” Sank-Peturburg 1990 y.
- 10.Ельяшевич М.А.“Атомная и молекулярная спектроскопия” М 1962 г.
- 11.Атахаджаев А.К., Jo’rayev B.S.“Molekulyar optika” Samarqand-1992 y.
12. Вебер А.“Спектроскопия в газах и жидкостях” Москва-1982 г.
13. Брандмюллер И., Мазер Г.“Введение в спектроскопию К.Р.С” Москва “Мир”-1984г 628 с.
14. Волькенштейн М.В.“Строение и физические свойства молекул” М.Л. 1995г.
15. Сущинский М.М. “Спектры К.Р. молекул и кристаллов” М. “Наука”-1969г.
16. Атахаджаев А.К., Тухватуллин Ф.Х.“Спектральное распределение интенсивности крими линии Релей рассеяния жидкостей и растворов” Т. Фан. 1981 г.

17. Вукс М.В. “Рассеяние света в газах, жидкостях и растворах изд” ДГУ. 1977г.
18. Волькенштейн М.В. “Молекулярная оптика” ГТИ.1951 г.
19. Фабелинский И.А. “Молекулярное рассеяние света” М.Наука.1965г.
20. Мандельштам И.Л. УФН 1965г Т.58С.381-286.
21. Пементал Д., Мак-Клелон О. Водратная сву Л 1964.
22. “Международная конференция по молекулярная спектроскопии” материаллари. Самарканд 29-31 май 2006 й.
23. Куйлиев Б.Т., Орлова Н.Д., Позднякова А.Л., Тухватуллин Ф.Х., Жумабоев А. Доклады. Академии наук. Рес.Уз. Тошкент-2006 №6 С.17-22
24. Kuyliyev B.T., Orolova N.D., Pazdnyakova L.A., Tuxvatullin F.H., Jumaboyev A. Ukrainion Journali of Physics-2007. V.52.№5.P.445-448
25. “Zamonaviy fizika va astronomiyaning dolzarb muammolari” II Respublika International Conferen. Beregove. Crime.20.09-27.09.2009.P.30-31 ilmiy konferentsiyasi materiallari. 234 b. Qarshi-2010 y. Kuyliyev B.T., Orolova N.D., Pazdnyakova L.A., Tuxvatullin F.H., Jumaboyev A. XIX.
26. Хабибуллаев П.К., Буллавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х. и др. “Динамика молекул в жидкостях” Ташкент-2009 й.
27. Kuyliyev B.T., Orolova N.D., Pazdnyakova L.A., Taylor and Francis. May 2009 Journal spectroscopy letters, Volume 42 Issul 4, Pages 199-202
28. Tuxvatullin F.H., Jumabaev A., Hushvaktov H., Absanov A., Sharifov G. Journal of Atomic Molecular, and Optical Physis (in press).
29. Tuxvatulin F.X., Jumaboev A. va boshqalar Optika Samarqand 2004
30. “Zamonaviy fizika va astronomiyaning dolzarb muammolari”. XX Respublika ilmiy konferensiya materiallari. 243 b. Qarshi 2010 y.
31. XX International conferen. Spectroscopy of molecules and crystals Beregove, Crimea, Ukraine – 2011. P.367.
32. “Nanotexnologiya va qayta tiklanadigan energiya manbalari: muammolar va yechimlar” . Respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. Qarshi 2012 y. 350 b.

33. Fan, tarqiyot va yoshlar. Ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. Qarshi.
“To’plam” 2012 y. 97-103 b.

34. Internet ma’lumotlari:

www.bankreferatov.ru.kasu.uz

www.Astirun.uz

www.ziyonet.uz