

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

QARSHI DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA-MATEMATIKA FAKULTETI
FIZIKA KAFEDRASI

CHO'LIYEVA YULDUZ SHOXNAZAR QIZINING

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

**PIRROLA VA UNING ERITMALARIDA MOLEKULALARARO
O'ZARO TA'SIRLARNI KVANTO-KIMYOVIIY
HISOBLASHLAR YORDAMIDA O'RGANISH**

mavzusida yozgan

BITIRUV MALAKAVIIY ISHI

Ilmiy rahbar: dots.A. Absanov

“Himoyaga tavsiya etilsin”

Fizika – matematika fakulteti

dekani: _____ prof. A.Tashatov

“ _____ ” _____ 2015 yil

MUNDARIJA

Kirish	3
 I-BOB. Suyuqliklarda yorug'lik sochilishining fizik asoslari	
1.1. Suyuqliklarda yorug'likning sochilishi. A.Eynshteyn nazariyasi.....	7
1.2. Raman effekti va uning kvant nazariyasi	22
1.3. Molekulalararo o'zaro ta'sir turlari	28
1.4. Vodorod bog'lanish va uning tabiati	38
 II-BOB. Tajriba olish texnikasi va usullari	
2.1. DFS-52 spektrometri va uning ishlash usuli	41
2.2. Qaralayotgan moddaning fizik, ximik xossalari va amaliy ahamiyati	45
2.3. Moddalarni eksperimentga tayyorlash	47
2.4. Natijalar va kvanto-kimyoviy hisoblashlar xatoligi	49
2.5. Olingan natijalar va ularning tahlili.....	51
Xulosa	57
Foydalanilgan adabiyotlar	58

Kirish

Kombinatsion sochilish (KS) spektroskopiyasi va kvanto-kimyoviy hisoblashlar orqali moddalar va ularning eritmalari misolida molekulalararo vodorod bog‘lanishning spektral namoyon bo‘lishini tadqiq etish moddaning suyuq holati molekulyar nazariyasini rivojlantirishga, tirik organizmlar hayot faoliyatida molekulyar agregatsiya va molekulalararo ta’sirlar ahamiyatini yanada to‘laroq tushunish imkoniyatini beradi.

Bitiruv malakaviy ishining dolzarbligi: Ma’lumki agar jism bir agregat holatdan ikkinchi holatga o‘tsa, uning nafaqat fizika-kimyoviy xossalari balki spektroskopik parametrlari ham o‘zgaradi. Spektrlarning intensivligi, konturning shakli, qutblanish darajasi, chastotasi kabi parametrlari o‘zgaradi.

Molekulalararo o‘zaro ta’sir tarkibini tushuntirish uchun molekulalararo o‘zaro ta’sir kuchlarini ikki guruhga bo‘lish mumkin. Birinchisi universal ta’sir kuchlari, ikkinchisi maxsus xarakterga ega bo‘lgan ta’sir kuchlari. Universal ta’sir deganda hamma holatlarda namoyon bo‘ladigan kuchlar tushuniladi. Bu kuchlar Van-der-Vals kuchlari ham deb yuritiladi. Bu kuchlar tabiatini tushunish ancha vaqtlar murakkabligicha qoldi. Qachonki atomlar orasidagi ta’sir kuchi tabiati to‘lig‘icha o‘rganilganidan so‘ng molekulalar o‘rtasidagi ta’sir kuchlari to‘g‘risida fikr yuritish mumkin.

Odatda molekulalararo ta’sir kuchlarining energiyasi 0,5-10 kkal/mol ni tashkil etadi. Bu kuch tabiatini to‘la tushunish yoki fizik mohiyatiga to‘la yetish uchun vodorod bog‘lanishlarini spektroskopik o‘rganish mumkin, chunki ichki molekulyar va molekulalararo ta’sir kuchlari H-bog‘lanishda keng namoyon bo‘ladi. Shuning uchun ham biz bitiruv malakaviy ishining mavzusini “Pirrola va uning eritmalarida molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni kvanto-kimyoviy hisoblashlar yordamida o‘rganish” deb tanladik. Bunday eksperimental va kvanto-kimyoviy hisoblashlar o‘tkazish kelgusida mukammal nazariy ishlanmalar yaratilishiga asos bo‘lish mumkin. H-bog‘lanishning energiyasi Van-der-Vals o‘zaro ta’sir

energiyasidan katta bo'lganligi uchun u o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning spektral xarakteristikalariga kuchliroq ta'sir qiladi.

Bitiruv malakaviy ishining obe'kti va predmeti: Ishning asosiy vazifasi Pirrola va uning monomer va dimer agregatsiyalari xona temperaturasida (295 K) o'rganildi. Vodород bog'lanish, bog' uzunligi, bog'lanish energiyasi.

Bitiruv malakaviy ishining maqsadi va vazifalari: Pirrola va uning eritmalarida kombinatsion sochilishini va kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazish orqali molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini o'rganishdan iborat:

- Tadqiqot o'tkaziladigan DFS 52-spektrometrini va uning ishlash usulini o'rganish.
- Yorug'lik manbai, geliy-neon ($He - Ne$; $\lambda = 6328\text{\AA}$) va argon $\lambda = 4880\text{\AA}$ lazerlarini ishlash usulini o'rganish.
- Tajriba qurilmasini yustrovka va fokusirovka qilishlarni o'rganish.
- Pirrola molekulasi kombinatsion sochilish spektrini qurilmada qayd qilish va qayta ishlashni o'rganish.
- Pirrola molekulasida agregatsiyalarida kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazish.

Mavzuni o'rganish darajasining qiyosiy tahlili: Bunday tadqiqotlarni o'tkazish o'z qiyinchiliklari bilan ham murakkab hisoblanadi. Qurilmaning ajrata olish qobiliyati kichikligi, optik sistemalarda murakkab yustrovkalar o'tkazish va hakoza. Shu sababli ilmiy adabiyotlarda mavzuga tegishli ma'lumotlar ko'p uchramaydi. Raman effekti orqali moddalar xossalari o'rganish Sank-Peterburg, Kiyev, SamDU, O'zMU va Qarshi Davlat universitetlarida olib boriladi va hamkorlikda qator maqolalar chop etilgan. Afsuski tajriba natijalarini talqin qilishda yagona fikr mavjud emas. Nazariy tadqiqotlar mohiyatni sifat jihatdan tushuntiradi. Nazariya va tajriba natijalari miqdoriy jihatdan bir-biridan farq qiladi.

Bitiruv malakaviy ishining natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati: Umuman ishlab chiqarish sanoatida pirrola juda ko'p ishlatiladi. Ulardan to'g'ri foydalanish uchun ularning spektroskopik xossalari bilish muhim ahamiyat kasb etadi. Xuddi shunday pirrolaning molekulalararo o'zaro ta'sirda ishtirok etish qobiliyatini o'rganish nafaqat fanda, balki amaliyotda ham katta ahamiyatga

egadir. Chunki pirrola kimyo, biologiya sanoatida silliqlovchi pastalar, buyoqlar ishlab chiqarishda keng ishlatiladi.

Olingan natijalar va ilmiy adabiyotlardagi shunga o'xshash ma'lumotlar molekullarning tuzilishi, spektroskopik doimiylar va fizika, atmosfera fizikasi bo'limlarini rivojlantirishda hissa qo'shishi mumkin. Tadqiqotlar natijalari ilmiy jurnallarda chop etilgan. Talabalar, magistrlar va ilmiy tadqiqotchilar dissertatsiyalarini tayyorlashda va maxsus kurslardan ma'ruza tayyorlashda foydalanish mumkin.

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

2012 yil 12-noyabr kuni prezidentimiz I.A.Karimov O'zbekiston Respublikasi Oliy majlisi qonunchilik palatasi va senatining qo'shma majlisida «Mamlakatimizda demokratik islohatlarni yanada chuqurlashtirish va fuqorolik jamiyatini rivojlantirish konsepsiyasi» mavzusida ma'ruza qildilar [2]. O'z ma'ruzalarida oltita yo'nalishni eng muhim ustuvor vazifalar sifatida belgilab berdilar

1. Davlat hokimiyati va boshqaruvini demokratlashtirish
2. Sud-huquq tizimini islox 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. Fuqorolik jamiyati institutlarini shakllantirish va rivojlantirish
6. Demokratik bozor iqtisodiyotlarini va iqtisodiyotni belgilashtirishni yanada chuqurlashtirish

Oltinchi yo'nalishda raqobat to'g'risida to'xtalgan edilar. Raqobatlasha oladigan har qanday mahsulot yoki shu mahsulotni ishlab chiqarish ilmiy asoslangan bo'lsagina yoki uni ishlab chiqaruvchining ilmiy saviyasi yuqori darajada bo'lgandagina, bu mahsulot raqobatlasha olishi mumkin ekanligini anglash mumkin. Ushbu konsepsiya O'zbekiston zaminida yashayotgan fizik,

ximik, biologik, shifokor, injener, iqtisodchi, moliyachi, talaba va hokazo kim bo‘lishidan qat’iy nazar hamma uchun dasturi amal bo‘lib xizmat qiladi.

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 hurmatli prezidentimizning «O‘zbekiston mustaqillikka erishish ostonasida» kitobida davlatimiz rahbarining ayni shu tarixiy davridagi faoliyatiga bag‘ishlangan.

Xalqimizning asriy orzusi bo‘lgan milliy istiqlol mavzusiga oid fikr va qarashlari atroflicha o‘z aksini topgan.

Vatan uchun, xalqning tinchligi va farovonligi uchun chinakam fidoylik namunasi aks etgan. Asarni o‘qigan sari jo‘shib, to‘lib ketasan va shunday insonlarga sodiq bo‘lgining keladi [3].

Bitiruv malakaviy ishining ilmiy yangiligi:

- Pirrola spektrlari Raman effekti yordamida DFS-52 spektrometrida qayd qilish o‘rganildi va qayd qilindi.
- Tajriba natijalarini puxta tushunish uchun kvanto-kimyoviy hisoblashlar o‘tkazildi.
- Pirrolaning monomer va dimer agregatsiyalari strukturaviy tuzilishi aniqlandi.
- Vodorod bog‘lanish mavjudligi, energiyasi, bog‘ uzunligi aniqlandi.
- Tajriba natijalariga va nazariy manbalarga asoslanib ilmiy tushuntirish berilib xulosalandi.

Bitiruv malakaviy ishining tuzilishi va hajmi: Kirish, ikki bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar, 18-ta rasm, 2-ta jadvalni o‘z ichiga olgan 61 sahifada bayon etilgan.

I BOB. Suyuqliklarda yorug'lik sochilishining fizik asoslari

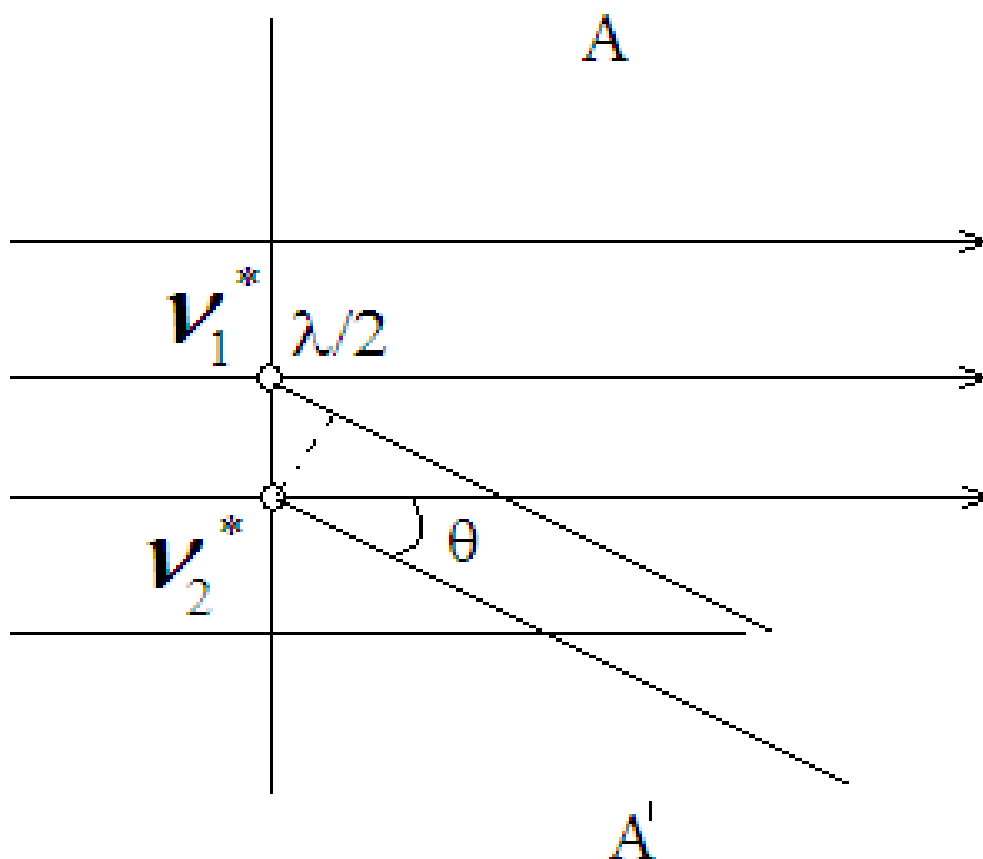
1.1.Suyuqliklarda yorug'likning sochilishi.

A.Eynshteyn nazariyasi

Elektronlarning majburiy tebranishlari tufayli paydo bo'ladigan ikkilamchi to'qlinlar yorug'lik to'qlini olib kelayotgan energiyaning bir qismini chetga sochib yuboradi. Boshqacha qilib aytganda, moddada yorug'lik tarqalayotganda yorug'lik to'qlinining o'zgaruvchi maydoni ta'siri ostida tebrana oladigan elektronlar bo'lishi yetarlidir, bunday elektronlar esa har qanday moddiy muhitda yetarli miqdorda bor. Biroq shuni esda tutish kerakki, bu ikkilamchi to'qlinlar o'zaro kogerent bo'ladi va demak chetga sochib yuborilgan yorug'likning intensivligini hisob qilishda ularning o'zaro interferensiyasini e'tiborga olish kerak.

Haqiqatdan ham, agar muhit optik jihatdan bir jinsli bo'lsa, ya'ni uning sindirish ko'rsatkichini nuqtadan nuqtaga o'tilganda o'zgarmasa, u holda bir xil hajmlarda yorug'lik to'qlini bir xil elektr momentlari induksiylaydi, bu momentlarning vaqt o'tishi bilan o'zgarishi oqibatida bir xil amplitudali ikkilamchi kogerent to'qlinlar chiqadi [4,5].

Yassi monoxromatik to'qlinning bir jinsli muhitda tarqalish holi 1.1-rasmda ko'rsatilgan. $\vec{AA'}$ to'qlin frontida chiziqli o'lchamlari tushayotgan yorug'likning λ to'qlin uzunligiga nisbatan juda kichik bo'lgan V_1^* hajm ajratamiz, biroq bu hajm ichida molekulalar ancha ko'p bo'lib, muhitni yaxlit muhit deb hisoblash mumkin. θ burchak bilan xarakterlanadigan yo'nalishda V_1^* hajm ma'lum amplitudada va fazali ikkilamchi to'qlin chiqaradi. AA' to'qlin frontida hamisha boshqa bir V_2^* hajm ajratish mumkinki, u ham o'sha yo'nalishda shunday amplitudali ikkilamchi to'qlin chiqaradi, biroq u to'qlin yo'l farqi tufayli kuzatish nuqtasiga V_1^* dan chiqqan to'qlin fazasiga qarama-qarshi fazali bo'lib keladi.



1.1-rasm. Yorug'likni muhitda tarqalishi

Ajratilgan hajmlar orasidagi L masofa

$$L = \lambda / 2 \sin \theta \quad (1.1)$$

bo'lishi 1.1-rasmdan ko'rinib turibdi. Agar muhit mutlaqo bir jinsli bo'lsa, to'lqin frontida bir-biridan masofada joylashgan tengdosh hajmlarning ixtiyoriy ikkitasi chiqarayotgan ikkilamchi to'lqinlar bir-birini so'ndiradi.

Bir jinsli muhitda yorug'lik sochilmay faqat dastlabki yo'nalishda tarqaladi degan da'voni yuqoridagi fikr tasdiqlaydi. $\theta = 0$ burchakdan boshqa har qanday θ burchakka oid yo'nalishlarda ikkilamchi to'lqinlar bir-birini butunlay so'ndiradi, chunki tushuvchi to'lqinning $\theta = 0$ yo'nalishda tarqalishida ham ikkilamchi to'lqinlar sinfazali qo'shilib, o'tuvchi to'lqin hosil qiladi.

Shunday qilib, muhitning bir jinsli va ikkilamchi to'lqinlarning kogerent bo'lishi yorug'lik sochilmasligining zaruriy va yetarli shartidir. Haqiqatda esa ideal bir jinsli muhitlar bo'lmaydi. Real muhitlarda turli sababdan paydo

bo'lgan optik bir jinslimasliklar hamisha bo'ladi, bu esa yorug'likning ba'zi hollarda juda intensiv, ba'zi hollarda juda zaif sochilishini bildiradi.

Ikkilamchi to'lqinlarning interferensiyasi to'g'risida yuqorida keltirilgan mulohazalar Frenelning yorug'likning to'g'ri chiziqli tarqalishi nazariyasida yuritilgan mulohazalarga o'xshaydi. Agar Frenel nazariyasidagi, ikkilamchi to'lqinlar mavhum manbalardan chiqqan bo'lsa, sochilishda nurlantirgichlar real bo'lib, muhitning atom va molekulalaridan iborat. Biroq muhit bir jinsli bo'lishi uchun juda kichik teng hajmlarda bir xil tur nurlantirgichlar soni teng bo'lishi kerak. Biroq «qotib qolgan» bunday manzarani haqiqatda yaratib bo'lmaydi, shuning uchun bir jinslilik turli sabablarga ko'ra hamisha buziladi.

Frenelning mulohazalari bir jinslilikning buzilishi bu fazoviy bir jinslimasliklarda yuz beradigan difraksiya hodisalariga sabab bo'lishini ko'rsatadi. Agar bir jinslimasliklarning o'lchamlari katta bo'lmasa (ya'ni to'lqin uzunligiga nisbatan juda kichik bo'lsa), u holda difraksion manzarada yorug'lik hamma yo'nalishlarda ancha tekis taqsimlanadi. Yuqorida aytib o'tilganidek bunday mayda bir jinslimasliklar tufayli bo'ladigan difraksiya yorug'likning diffuziyasi yoki sochilishi deyiladi.

Agar muhitning bir jinslimasliklari qo'pol bo'lsa, ya'ni muhitning bir-biriga yaqin bo'lgan teng hajmli juda kichik qismlari intensivliklari sezilarli darajada farq qiladigan ikkilamchi to'lqinlarning munosabatlari bo'lsa u holda yorug'likning sochilishi juda aniq ko'rinadi. Muhitning bir jinsliliigi salgina buzilgan hollarda chetga sochilib yuborilgan yorug'lik dastlabki dastaning juda oz ulushini tashkil etadi va uni maxsus sharoitlardagina kuzatish mumkin. Tajriba yorug'likning sochilish hodisasi uchun muhitning ikkinlamchi to'lqinlar berish qobiliyatini o'zi emas, balki muhitning bir jinsliliigi buzilishi muhim ekanligini ko'rsatadi.

Manbadan kelayotgan deyarli paralell nurlar dastasi ichiga suv quyilgan kyuvetadan o'tayotgan bo'lsin. Agar suv juda yaxshilab tozalangan bo'lsa, yon tomonidan qaraganda yorug'lik deyarli ko'rinmaydi, ya'ni yorug'lik dastlabki dastadan chetga haqiqatda sochilmaydi: agar kyuvetaga bir tomchi atir tomizilsa,

yorug'lik intensiv ravishda sochiladi: yorug'lik dastasi hamma tomondan yaxshi ko'rinadi; agar kyuveta ancha qalin bo'lsa, u holda hamma yorug'lik har tomonga sochilib, kyuvetaning orqasida aniq ko'rinadigan dastlabki dasta o'rniga sochilgan yorug'likning diffuz maydonigina ko'rinadi. Bir tomchi atir qo'shilishi kyuveta ichidagi suvning nihoyatda ko'p molekulalarning xossalarini ko'p o'zgartirib yubormaydi, albatta, biroq atirda erigan holda yurgan modda zarralari suvli eritmada cho'kib, suvda muallaq yuradigan mayda tomchilar, ya'ni emulsiya hosil qiladi. Bunday bir jinslimasliklarning borligi ikkilamchi to'lqinlarning o'zaro interferensiyasi uchun juda boshqa sharoitlar yaratadi. Natijada birlamchi dasta bu bir jinslimasliklar tufayli difraksiyalanib, xira muhitga xos bo'lgan sochilish manzarasini hosil qiladi.

Muhitning optik jihatdan bir jinsliligi to'g'risidagi masalaga ya'ni bir marotoba qaytamiz: ma'lumki, bir jinslilikning buzilishi yorug'lik sochilishining fizik sababidir. Yuqorida aytib o'tilganidek optik jihatdan bir jinsli bo'lgan muhitda uning bir-biriga yaqin bo'lgan teng hajmli juda kichik qismlari yorug'lik to'lqinining ta'siri ostida intensivliklari bir xil bo'lgan ikkilamchi nurlanishlar manbai bo'lib qoladi. Demak tegishli qismlar yorug'lik to'lqinining o'zgaruvchi maydoni ta'siri ostida bir-biriga teng bo'lgan elektr momentlariga ega bo'ladi, bu momentlarning vaqt o'tishi bilan o'zgarishi natijasida ikkilamchi nurlar paydo bo'ladi. Optik jihatdan bir jinslilik sharti muhitning turli qismlarining sindirish ko'rsatgichi bir xil qiymatga ega bo'lishini bildiradi. Bundan muhitning butun hajmdagi sindirish ko'rsatgichi doimiy bo'lganda yorug'likning sinish hodisalari yuz bermaydi, degan xulosa chiqadi.

Demak muhitning bir jinsliligini buzish uchun sindirish ko'rsatgichining doimiyligini buzish zarur. Sindirish ko'rsatgichi esa muhitning ε dielektrik singdiruvchanligiga munosabat orqali bog'langan.

$$n = \sqrt{\varepsilon}, \varepsilon E = E + 4\pi P \quad (1.2)$$

Nihoyat, muhitning qutblanishi, ya'ni muhitning birlik hajmining tashqi E maydon ta'siri ostida olinadigan elektr momenti $P = Np$ ga teng, bu yerda N -birlik

hajmdagi molekular soni, p -bu molekulalardan har birining E maydon ta'siri ostida oladigan elektr momenti. Bu moment kattaligini $p = \alpha E$ ko'rinishda tasvirlash mumkin, bu yerdagi α koeffitsiyent qutblanuvchanlik koeffitsiyenti deb atalib, molekulaning tuzilishini xarakterlaydi. Shunday qilib,

$$\mathbf{P} = N\alpha\mathbf{E} \quad (1.3)$$

ya'ni

$$\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi N\alpha\mathbf{E} \quad (1.4)$$

yoki

$$\varepsilon = 1 + 4\pi N\alpha \quad (1.5)$$

Shunday qilib, sindirish ko'rsatkichining o'zgaras bo'lishi chiziqli o'lchamlari to'lqin uzunligiga nisbatan uncha kichik bo'lmagan teng hajmlar uchun $N\alpha$ ko'paytma muhitning turli joylarida bir xil bo'lishini bildiradi. Demak agar optik jihatdan bir jinsli bo'lgan muhit mutlaqo bir xil molekulalardan tashkil topgan (α o'zgaras) bo'lsa, u holda N ham o'zgaras bo'lishi, ya'ni muhitning zichligi hamma yerda bir xil bo'lishi kerak; agar muhit har xil molekula yoki gruppalardan tashkil topgan bo'lsa, u holda sindirish ko'rsatkichini o'zgarmaydigan qilish uchun N bilan α ni tegishlicha tanlab olish kerak. Masalan, benzol bilan uglerod sulfidning keraklicha qilib olingan aralashmasiga shisha parchalari botirilganda bu aralashma bir jinsli muhit bo'ladi: shisha bilan suyuqlik orasidagi bo'linish chegarasi sezilarli bo'lmay qoladi.

Shakli muntazam bo'lmagan chog'roq shaffof parchalarning sindirish ko'rsatkichini aniqlashda bu hodisadan foydalanish mumkin; suyuqliklar aralashmasini unga botirilgan parchaning chegaralari iloji boricha monoxromatik yorug'lik bilan yoritilganda ko'rinmay qoladigan qilib tanlab olib, tegishli to'lqin uzunlikda aralashmaning sindirish ko'rsatkichini aniqlash kerak bo'ladi; qo'yish kerak mineralogiyada bu usul ko'p qo'llaniladi; shishaning sindirish ko'rsatkichinigina emas, balki uning dispersiyasini ham mana shu prinsip asosida juda tez aniqlashning qulay texnik metodi ham ishlab chiqilgan: shishaning

dispersiyasini tez aniqlash tayinli optik parametrlarga ega bo'lgan shisha pishirishning texnologik jarayonini nazorat qilib turishga ko'p yordam qiladi.

Agar shishaning bir zarrasi o'rniga bir jinsli shishaning mayda kukuni, masalan o'lchamlari S mm ga yaqin bo'ladigan qilib maydalangan ma'lum navli optik shisha olib va uni yassi devorli kyuvetaga solib, ustidan biror suyuqlik qo'yilsa, bunday kyuveta, umuman aytganda, optik bir jinsliligi juda yomon bo'lgan jism hisoblanadi; kyuveta orqali o'tayotgan yorug'lik dastasi chetga ko'p sochilib, dastlabki dasta yo'nalishida qiyosan oz yorug'lik o'tadi. Agar suyuqlik yuqorida aytib o'tilganidek qilib tanlab olinsa, bu kyuveta fizik jihatdan (jisman) juda bir jinsli bo'lmaganiga qaramay optik jihatdan bir jinsli jism bo'ladi, bu kyuvetadan yorug'lik susaymasdan o'tadi. Haqiqatda esa tajribani bunday oddiy ko'rinishda o'tkazib bo'lmaydi, chunki shisha bilan suyuqlikning dispersiyasi har xil bo'ladi, shu sababli muhit to'lqinlarning qiyosan tor intervalidagina optik jihatdan bir jinsli bo'ladi. Xuddi mana shu spektral sohaning yorug'ligi kyuvetadan susaymasdan o'tadi, boshqa nurlar esa chetga ko'p sochiladi. Kyuvetaning qalinligi yetarlicha bo'lganda o'tadigan yorug'likni to'lqin uzunliklarning juda tor ($3,0-5,0$ nm chamasida) intervali bilan chegaralanadigan qilish mumkin, shuning uchun bunday kyuveta yaxshigina svetofiltr vazifasini o'taydi. Kyuveta salgina isitilganda o'tayotgan yorug'likning rangi qanday o'zgarishini kuzatib borish mumkin; rangini o'zgarishiga shishaning sindirish ko'rsatkichi temperaturaga turlicha bog'liq ekanligi sabab bo'ladi [6-9].

Ko'zga ko'rinadigan yorug'lik to'lqinining uzunligiga nisbatan kichik bo'lgan zarralarda yorug'likning sochilishini laboratoriya sharoitida birinchi bo'lib, Tindal kuzatgan (1869 y). Turli burchaklar hosil qilib sochilgan yorug'lik dastlabki oq yorug'likdan ko'k bo'lishi bilan farq qilishini, tushayotgan yorug'lik yo'nalishiga nisbatan $\pi/2$ burchak hosil qilib, sochilgan yorug'lik to'lqin yoki deyarli to'liq chiziqli qutblanishini ham Tindal payqagan.

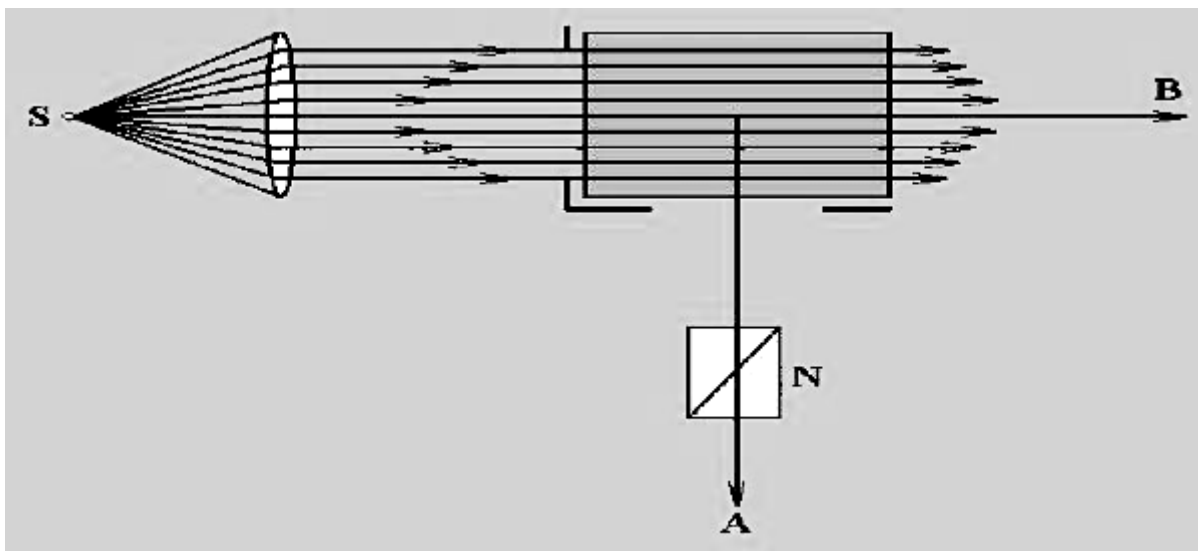
Tindal osmonning zangori bo'lib ko'rinishiga quyosh yorug'ligini yer atmosferasidagi chang zarralarida sochilishi sabab bo'lsa kerak deb taxmin qilingan. Ko'p hollarda tabiiy ravishda paydo bo'lgan optik bir jinslimasliklar

tufayli yorug'lik intensiv ravishda sochiladi. Optik bir jinslimasligi oshkor bo'lgan muhitlar xira muhitlar deyiladi. Xira muhitlar jumlasiga tutun (gazdagi qattiq zarralar) yoki tuman havodagi suyuqlik tomchilari, masalan, suv tomchilari), suyuqlikda suzib yuradigan qattiq zarralardan iborat suspenziyalar, emulsiyalar, ya'ni bir suyuqlik tomchilarining ularni eritmaydigan suyuqlikdagi aralashmalari (masalan, sut yog'ining suvdagi emulsiyasidir), sadaf, opal yoki sut rang shisha kabi qattiq jismlar va shu kabilar kiradi. Bu hollarning xammasida xira muhit yorug'likni birmuncha ko'p sochib yuboradi, bu hodisa odatda Tindal hodisasi deyiladi.

Zarralarning o'lchami to'liq uzunligiga nisbatan kichik bo'lgan xira muhitlarda yorug'likning sochilishini o'rganish natijasida Tindal va undan keyingi tadqiqotchilar tajribada kashf etgan va nazariy jihatdan Reley asoslab bergan ba'zi umumiy qonuniyatlar topildi. Bu qonuniyatlar to'g'risida qo'yidagi oddiy tajriba, misolida tasavvur hosil qilish mumkin.

To'g'ri burchakli kyuveta to'la suvga bir necha tomchi sut tomizib, suv xiralashtiriladida, unga intensiv yorug'lik dastasi yuboriladi. Suvda yorug'lik dastasining izi aniq ko'rinib turadi.

Yon tomondan turib A yo'nalishda kuzatganda (1.2-rasm) sochilgan yorug'lik S manbadan kelayotgan yorug'likka qaraganda zangoriroq bo'ladi; qalinligi yetarlicha bo'lgan kyuveta orqali B yo'nalishda o'tib, uzun to'liqli nurlarga boyigan yorug'lik qizg'ish bo'ladi. Sochilgan yorug'lik dastlabki dastaga nisbatan 90^0 burchak ostida N qutblovchi (polyarizator) orqali kuzatganda S dan kelayotgan dastlabki yorug'lik tabiiy yorug'lik bo'lsa ham sochilgan yorug'lik chiziqli qutblangan ekanligi ko'rinadi. Sochilgan yorug'likda elektr vektorining yo'nalishi dastlabki dasta va kuzatish yo'nalishi orqali o'tuvchi tekislikka perpendikulyar bo'ladi.



1.2-rasm. Tindal tajribasi chizmasi

Agar turli yoʻnalishlar boʻylab sochilgan yorugʻlikning intensivligini baholasak, bu intensivlik dastlabki dasta oʻqiga nisbatan va unga perpendikulyar boʻlgan chiziqqa nisbatan simmetrik boʻladi (1.3-rasm). Turli yoʻnalishlar boʻylab sochilgan yorugʻlikning intensivligi taqsimotini koʻrsatuvchi grafik sochilish indikatrasi deb ataladi. Tushayotgan yorugʻlik tabiiy yorugʻlik boʻlganda sochilish indikatrasi (1.3-rasm) da koʻrsatilgandek boʻlib,

$$I \sim 1 + \cos^2 \theta$$

formula bilan ifodalanadi. Fazoviy indikatrasi egri chiziqni (1.3-rasm) BB oʻqiga nisbatan aylantirib hosil qilinadi. Reley oʻlchamlari tushayotgan yorugʻlikning toʻlqin uzunligiga nisbatan kichik boʻlgan sferik zarralarda sochilgan yorugʻlikning intensivligini hisob qilib (1899 yil), dastlabki yorugʻlik tabiiy yorugʻlik boʻlgan holda sochilgan yorugʻlikning intensivligi quyidagiga teng boʻlishini topdi.

$$I = I_0 \frac{9\pi^2 \varepsilon_0^2 N (V^I)^2}{2\lambda^4 L} \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + \varepsilon_0} \right)^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.6)$$

Bu yerda, N - sochib yuboruvchi hajmdagi zarralar soni, V va ε_0 zarralarning hajmi va dielektrik singdiruvchanligi, ε - zarralar muallaq holda yurgan muhitning dielektrik singdiruvchanligi, θ - sochilish burchagi, I_0 - tushayotgan yorugʻlikning intensivligi, L - sochib yuboruvchi hajmdan kuzatish nuqtasigacha boʻlgan masofa.

Bunday yirikroq zarralarda sochilgan yorug'likning to'liq uzunligiga bog'lanishi kamroq sezilarli bo'ladi, ya'ni sochilgan yorug'lik zarralar mayda bo'lgan holdagidan kamroq zangori bo'ladi. Sochilgan yorug'lik faqat qisman qutblangan bo'ladi, bunda qutblanish darajasi zarralarning o'lchami va shakliga bog'liq bo'ladi. Sochilgan yorug'lik intensivligining burchaklar bo'yicha taqsimoti ham murakkablashadi: sochilish diagrammasi AA chiziqqa nisbatan (1.3-rasm) simmetrik bo'lmay, zarralarning o'lchami, shakli va tabiatiga hamda atrofdagi muhitga qarab juda murakkab ko'rinishda bo'ladi, faqat dastlabki dasta yo'nalishiga nisbatan simmetrik bo'ladi.

Bu murakkabroq qonuniyatlar yirik zarralar xira muhitlarda yorug'likning sochilishini nazariy tomondan talqin etishni juda qiyinlashtiradi. Shunga qaramasdan bunday hollar ancha katta qiziqish uyg'otadi, chunki ular odatda ko'p ximiyaviy reaksiyalarning mahsuli bo'lgan kolloid eritmalar va xira muhitlarni tadqiq etishda yuz beradi. Shuning uchun bunday o'lchash ishlari kolloid ximiya, analitik ximiya va biologiyada keng qo'llanilib, tadqiq etishning nefelometrik metodlarining mavzusi hisoblanadi.

Osmonning zangori bo'lib ko'rinishiga yorug'likning chang zarralarida sochilishi sabab bo'ladigandek ko'rinar edi, biroq tajribalar bunday emasligini ko'rsatdi, chunki chang bo'lmagan toza atmosferada (baland tog'lardagi observatoriyalarda) osmon yanada to'q, zangori bo'lib ko'rinadi va uning yorug'ligi qutblanadi. Keyingi nazariy va eksperimental tadqiqotlar bu hodisalarning hammasiga yorug'likning havoda molekulyar sochilishi sabab bo'lishini ko'rsatdi.

Biz yuqorida aytilgan ma'noda xira deb atash mumkin bo'lmaydigan muhitlar bilan ish ko'riladigan hollar, ya'ni muhit aralashma yoki boshqa jinslardan yaxshilab tozalangan suyuqlik (yoki gaz) dan iborat bo'lgan hollar ancha katta qiziqish uyg'otadi.

Bunday muhitlarda yorug'lik sochiladi va demak optik jihatdan bir jinslimaslik paydo bo'lishiga olib keladigan fizik sabab bor (L.I. Mandelshtam,

1907 y). Ideal toza muhitlarda optik bir jinslimaslik yuzaga kelishining fizik sababi birdaniga topilgani yo'q.

Juda muhim bo'lgan bir xususiy holda bir jinslilikni buzishga olib keladigan sababni M. Smoluxovskiy (1908 y) ko'rsatib berdi. Gaz yoki suyuqlikning kritik temperaturasida yorug'lik intensiv ravishda sochilishi (kritik opalessensiya) ko'pdan beri ma'lum edi. Smoluxovskiy kritik temperaturada muhitning siqiluvchanligi juda katta ekanligiga diqqat qildi (kritik nuqtada nazariy

tomondan $\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ ifoda cheksizlikka intiladi). Bunday sharoitlarda kichikroq

hajmlarda o'rtacha zichlikdan sezilarli chetlanishlar paydo bo'lishi mumkin, chunki siqiluvchanlikning katta bo'lishi issiqlik harakati kichik hajmlarda zichlikning sezilarli variatsiyalarini (zichlik fluktuatsiyalari) yuzaga keltirishga qodir ekanligini bildiradi. Optik bir jinslilikning buning oqibatida bo'ladigan buzilishi yorug'likning ko'p sochilishiga sabab bo'ladi. Shunday qilib, Smoluxovskiy kritik opalessensiya hodisasini izohlab berib, shu bilan yorug'likning umuman sochilishiga olib keladigan bir jinslilikning buzilish sababini qayerdan izlash kerakligiga ko'rsatma berdi. Yorug'likning molekulyar sochilishining tajribada osongina qilib ko'rish mumkin bo'lgan holi ba'zi eritmalarini tadqiq etishda kuzatiladi. Eritmalarda biz molekulalarning ikki (yoki undan ko'proq) navlarining aralashmasi bilan ish ko'ramiz, bu molekulalar o'zlarining qutblanuvchanligi qiymatlari bilan xarakterlanadi. Odatdagi sharoitlarda bir modda ikkinchi moddada shunchalik tekis taqsimlanadiki, eritmalarining ham optik jihatdan bir jinsliliigi odatdagi suyuqliklarnikidan qolishmaydi. Biz erigan moddaning konsentratsiyasi butun hajmda bir xil va o'rtacha konsentratsiyadan farq (konsentratsiya fluktuatsiyalari) juda oz deya olamiz. Biroq moddalarning ko'p kombinatsiyalari ma'lumki, ular odatdagi temperaturada bir-birida qisman eriydi, biroq temperatura ko'tarilganda bir-birida qisman eriydi, biroq temperatura ko'tarilganda bir-biri bilan istalgan nisbatda aralasha oladi. Aralashishning kritik temperaturasi deb ataladigan temperaturadan yuqori temperaturada moddalar bir-birida istalgan nisbatda aralashib ketadi. Agar

ikki suyuqlikning og'irlik nisbatlari ma'lum bir tarzda tanlab olingan bo'lsa bu temperaturada ikki suyuqlik butunlay aralashadi. Masalan, og'irlik jihatdan 20 qism uglerod sulfid va 80 qism metil spirt olinsa, ulardan 40°S da juda bir jinsli aralashma hosil qilinadi. Pastroq temperaturada bu moddalar qisma erib, aniq ko'riladigan ikki suyuqlik bo'ladi: uglerod sulfidning spirtidagi eritmasi va spirtning uglerod sulfidagi eritmasi. Temperatura 40°C dan yuqori bo'lganda aralashtiriladigan moddalarning og'irlik nisbatlari har qanday bo'lganda ham bir jinsli aralashma hosil qilish mumkin. Bizni qiziqtirayotgan nuqtai nazardan qaraganda aralashishning kritik temperaturasi aralashmaning shunday holatini xarakterlaydiki, bu holatda biror joydagi konsentratsiya tekis taqsimotdan ayniqsa oson farq qilish mumkin. Binobarin, aralashishning kritik temperaturasida konsentratsiyaning katta-katta fluktuatsiyalari va optik jinslilikning bu fluktuatsiyalarga aloqador bo'lgan buzilishlari bo'lishi mumkin. Haqiqatdan ham, aralashishning kritik temperaturasida bunday aralashmalarda yorug'lik juda kritik temperaturasida bunday aralashmalarda yorug'lik juda intensiv ravishda sochiladi, uni tajribada kuzatish oson.

Hajmda bo'ladigan sochilishga o'xshagan hodisalar suyuqlik sirtida ham bo'lishi mumkin. Suyuqlikning tinch sirti ko'zguga o'xshaydi, unga tushayotgan yorug'lik ma'lum bir yo'nalishda tekis qaytadi. Biroq suyuqlik sirti biror sababdan, masalan, chayqalishdan g'adir-budir bo'lib qolsa, yorug'likning birmuncha qismi chetga tarqoq ravishda sochiladi. Suyuqlikning tekis sirti, umuman aytganda, molekulyar harakat tufayli muttasil ravishda "buzilib" turishi kerak va bu notekisliklar to'lqin uzunligiga yaqin bo'lib qolganda yorug'lik tekis qaytmay, suyuqlik sirti xira bo'lib qoladi.

Biroq odatdagi sharoitlarda suyuqlik sirtining xiraligi kam bilinadi, chunki issiqlik harakatining ko'rsatadigan buzish ta'siriga molekulyar tutinish kuchlari qarshilik qilib erkin sirtini minimal holda tutishga harakat qiladi (sirt taranglik). Ikki suyuqlik chegarasida bu kapillyar kuchlar odatda suyuqlik bilan gaz orasidagi chegaradagidan kichik bo'ladi. Bu kuchlar aralashishning kritik temperaturasi yaqinida ayniqsa kichik bo'ladi. Haqiqatan ham, bu holda yorug'lik chegaradan

Frenel qonunlari bo'yicha qaytibgina qolmay, balki hamma tomonga intensiv ravishda sochiladi ham (L.I.Mandelshtam, 1913 y). Yaxshi sharoitlarda molekulyar g'adir-budurlik shunchalik katta bo'ladiki, bunda yorug'lik katta burchak ostida tushganda ham tekis qaytmaydi; tekis qaytishning yo'qolishini to'lqin uzunligi kichik bo'lgan yorug'likda kuzatish oson, xira sirtlarda shunday bo'lishi kerak edi.

Erkin sirt sochilib yuborgan yorug'likni kuzatish ancha qiyin, biroq buni kapillyarlik doimiysi katta bo'lgan simob kabi suyuqlikda ham kuzatish mumkin bo'ladi (Raman, 1926 y). Sirlarning sochib yuborish qonunlari hajmlarning sochib yuborish qonunlaridan farq qiladi. Masalan, sirt sochib yuborgan yorug'likning intensivligi to'lqin uzunligining (to'rtinchi darajasiga emas) ikkinchi darajasigi teskari proporsionaldir; sochilgan yorug'likning qutblanish sharoitlari ham boshqachadir. Bu hodisalarning molekulyar noteksliklari to'lqin uzunligiga nisbatan kichik bo'lgan holdagi to'liq molekulyar nazariyasi tajribada ko'rinadigan qonuniyatlarga muvofiq keladi (F.S.BarishanskaY. 1936 y).

Yorug'likning toza moddada sochilishining fizik sababini Smoluxovski ko'rsatib bergan bo'lib, quyidagidan iborat: muhit molekulalarining issiqlik harakati statistik xarakterda bo'lgani tufayli muhitda zichlik fluktuatsiyalari paydo bo'ladi, bu fluktuatsiyalar ayniqsa kritik nuqta sohasida katta bo'ladi. Zichlikning yoki dielektrik singdiruvchanlikning $\Delta\varepsilon$ fluktuatsiyasiga ($\varepsilon = n^2$) sabab bo'ladi, bular esa aslida optik bir jinslimaslikdan iborat. Kritik nuqtadan uzoqda fluktuatsiyalar kritik nuqta sohasidagidek uncha katta bo'lmasada har qalay bo'ladi va toza moddada yorug'lik o'sha fluktuatsiyalar tufayli sochiladi.

Eynshteyn nazariyasi: 1910 yilda Eynshteyn yorug'likning kritik nuqtadan uzoqda molekulyar sochilishining miqdoriy nazariyasini yaratdi: bu nazariya dielektrik singdiruvchanlikning $\Delta\varepsilon$ fluktuatsiyalari tufayli muhitda optik bir jinslimaslik paydo bo'lish g'oyasiga asoslanadi.

Bu holda sochilgan yorug'likning intensivligi fluktuatsiyalar tufayli paydo bo'lgan optik birjinslimaslik bilan aniqlanadi. Sochilgan yorug'likning intensivligi

$\Delta\bar{\varepsilon}$ ning ishorasiga bog'liq bo'lmagani uchun intensivlik $(\Delta\bar{\varepsilon})^2$ ga proporsional bo'ladi. Oddiy elektrodinamik hisob intensivlikning quyidagicha bo'lishini ko'rsatadi.

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4 L^2} V^* V (\Delta\bar{\varepsilon})^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.7)$$

Bunda V^* – fluktuatsiya yuz bergan hajm bo'lib, yorug'lik to'lqinining uzunligiga nisbatan kichik, lekin ichida molekullar ko'p.

Endi yorug'likning molekulyar sochilishida optik bir jinslimaslikning o'lchovi $(\Delta\bar{\varepsilon})^2$ miqdor bo'ladi. Agar $\Delta\varepsilon$ fluktuatsiyalar zichlik va temperatura yoki ρ bosim va S entropiyadan iborat faqat ikki erkli termodinamik o'zgaruvchi bilan aniqlanadi deb hisoblasak, u holda :

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \right)_s \Delta\rho + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial S} \right)_\rho \Delta S; \quad (1.8)$$

$$(\Delta\bar{\varepsilon})^2 = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \right)_s^2 (\Delta\bar{\rho})^2 + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial S} \right)_\rho^2 (\Delta\bar{S})^2 \quad (1.9)$$

bu yerda $\Delta\rho, \Delta S$ - bosim va entropiyaning fluktuatsion o'zgarishlari, hosilalardagi indekslar differensial olayotganda qanday miqdor o'zgartirilmay turishini ko'rsatadi. Bu yerda $\Delta\rho$ va ΔS fluktuatsiyalar statistik jihatdan mustaqil ekanligi va demak, $\Delta\bar{\rho}\Delta\bar{S} = 0$ ekanligi e'tiborga olingan. Fluktuatsiyalar nazariyasi $(\Delta\bar{\rho})^2$ va $(\Delta\bar{S})^2$ miqdorlarni moddaning termodinamik xarakteristikalarini orqali ifodalashga va (1.7) munosabatni

$$I = I_0 \frac{\pi}{2\lambda^4} \frac{V}{L^2} \left\{ \left(\rho \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \right)_s^2 \beta_s kT + \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial\varepsilon}{\partial T} \right)_\rho \frac{\sigma^2 kT}{c_\rho \rho} \right\}; (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.10)$$

Ko'rinishda tasvirlashga imkon beradi, bu yerda ρ – ρ – muhitning zichligi $(\tilde{a}/\tilde{m}^3)$, T – absolyut temperatura, β_s – adiabatik siqiluvchanlik, σ – issiqlikdan kengayish koeffitsenti, c_ρ – $1\tilde{a}$ moddaning o'zgarmas bosim sharoitidagi issiqlik sig'imi, V – yorug'likni sochib yuborayotgan yuborayotgan hajm.

(1.10) formulada katta qavs ichidagi birinchi had zichlikning adiabatik fluktuatsiyalari (bosim fluktuatsiyalari) tufayli sochilgan yorug‘lik intensivligini bildiradi. Quyidagi taqribiy tenglikni yozish mumkin:

$$\left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_s^2 \approx \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_\rho^2 \approx \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_T^2 \quad (1.11)$$

Agar mashhur $\beta_T = \beta_s + \left| \frac{T\sigma^2}{\rho c_\rho} \right|$ termodinamik munosabatdan foydalansak (bu yerda β_T – izotermik siqiluvchanlik), (1.10) formula

$$I = I_0 \frac{\pi}{2\lambda^4} \frac{V}{L^2} \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_T^2 \beta_T kT (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.12)$$

ko‘rinishga keladi; bu formulani birinchi bo‘lib, Eynshteyn topgan va shuning uchun u Eynshteyn formulasi deyiladi.

(1.7) va (1.8) formulalardan Releyning $I - 1/\lambda^4$ qonuni kelib chiqadi. Shunday qilib, osmonning zangori bo‘lishiga yorug‘likning molekulyar sochilishi sabab bo‘ladi.

1.2.Raman effekti va uning kvant nazariyasi

Reley sochilishida sochilgan yorug'lik chastotasi tushuvchi yorug'lik chastotasiga mos keladi. Sochilishning bunday turini birinchi bo'lib Reley aniqlagani uchun Reley sochilishi deb yuritiladi. Bu sochilish kogerent tarzda yuz beradi.

Shu sababli ham Reley sochilishi yorug'likning kogerent sochilishidir (1.4-rasm). Biroq sinchiklab o'tkazilgan tekshirishlarning 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.

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 $\nu', \nu'', \nu''' \dots$ chastotalari orasidagi $\Delta\nu$ farq sochuvchi modda uchun xarakterli bo'lib, uning molekulalarining xususiy tebranishlari chastotalariga (ν^i) teng.

$$\Delta\nu_1 = \nu_0 - \nu' = \nu_1^i, \Delta\nu_2 = \nu_0 - \nu'' = \nu_2^i, \Delta\nu_3 = \nu_0 - \nu''' = \nu_3^i, \dots \quad (1.13)$$

- Yo'ldoshlar uyg'otuvchi chiziqdan ikki tomonda simmetrik yotuvchi chiziqlarning ikki sistemasidan iborat (1.4-rasm) ya'ni

$$\nu_0 - \nu_r = \nu_\nu - \nu_0 \quad (1.14)$$

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» yoʻldoshlar deb ataladigan birinchi yoʻldoshlar «binafsha» yoʻldoshlardan ancha intensivdir (1.4-rasm).

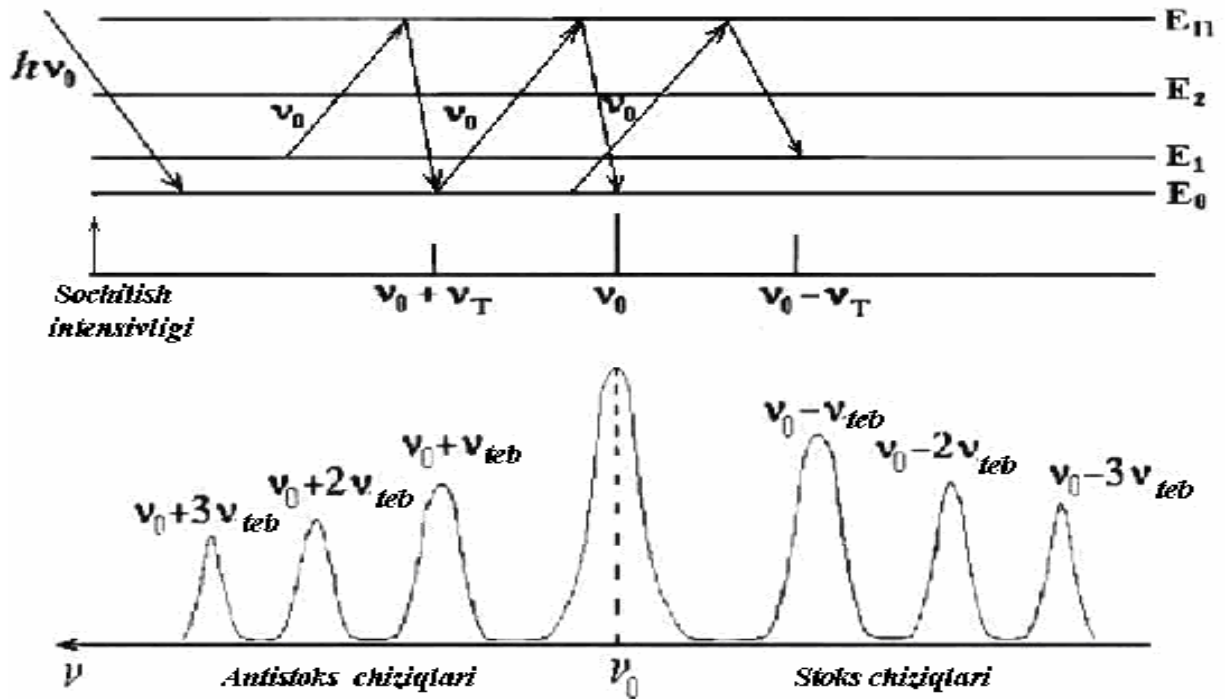
- Temperatura koʻtarilganda «binafsha» yoʻldoshlarning intensivligi tez ortadi.

Kombinatsion sochilishni birinchi boʻlib G.S. Landsberg va L.I.Mandelshtamlar hamda hind olimlari Raman va Krishnanlar kashf etishgan (1928 yil). Hind olimlari Nobel mukofotiga sazovor boʻlishgan. Chet el adabiyotlarida Raman effekti deb ham yuritiladi. Bu sochilishda odatda kombinatsion sochilish deyiladi. Quyida kombinatsion sochilish bilan batafsilroq tanishamz.

Kombinatsion sochilishning kvant nazariyasi: Yorugʻlik kvantlari toʻgʻrisidagi soddalashtirilgan tasavvurdan foydalanib, kombinatsion sochilish hodisasining mohiyatini anglab yetish mumkin. Kvant tasavvurlariga asosan ν_0 chastotali yorugʻlik maʼlum bir ulushlarda (kvantlar) tarzida tarqalib, bularning miqdori $h\nu_0$ ga teng bu yerda $h = 6,62 \cdot 10^{-12} \text{ j} \cdot \text{s}$ Plank taklif etgan universal doimiydir. Shuning uchun oʻzida ν_0 chastotali tebranishlar boʻlayotgan atom $h\nu_0$ energiya zahirasi ega boʻladi. Bu energiyani atom shunday chastotali yorugʻlik tarzida chiqarish mumkin. Bu nuqtai nazardan yorugʻlikning molekulalarda sochilishini yorugʻlik kvantlarining (yaʼni fotonlarning) molekulalar bilan toʻqnashishi deb qarash mumkin. Bu toʻqnashish natijasida fotonlar uchish yoʻnalishini oʻzgartiradi. Fotonlar bilan molekulalar oʻrtasidagi toʻqnashishlar elastik va noelastik boʻladi. Toʻqnashish elastik toʻqnashish boʻlgan holda molekulaning energiya va fotonning ν_0 chastotasi oʻzgarmaydi, bu hol Reley sochilishiga mos keladi (1.4-rasm). Releycha sochilish paytida sochilgan yorugʻlik kvantlarining chastotasi muhitga tushayotgan yorugʻlik kvantlarining chastotalariga mos keladi. Shuning uchun ham Releycha sochilishga elastik sochilish ham deyiladi [10,11].

Toʻqnashish noelastik boʻlgan holda fotonning energiyasi $h\nu_i$ tebranma kvant miqdorida oʻzgaradi. Agar yorugʻlik tebranish holatida boʻlmagan 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 katta chastotali nurga (qizil yo‘ldosh Stoks chizig‘iga) aylanadi. Bu yerda ν_0 uyg‘otuvchi yorug‘lik chastotasi ν_i molekula tebranishlarining chastotasi.



1.4-rasm. Reley (ν_0) va kombinatsion ($\nu_0 - \nu_{teb}$ 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. Yuqoriga aytilganlardan kelib chiqib kombinatsion sochilishga quyidagicha ta’rif berish mumkin.

Sochilgan yorug‘likning chastotasi tushayotgan yorug‘likning chastotasi ν_0 bilan molekulalar ichida bo‘ladigan tebranishlar chastotasining ν_i kombinatsiyasidan tarkib topadi. Shuning uchun bu sochilish kombinatsion sochilish deb ataladi.

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; tajriba 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.

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT^2}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT^1}}\right)} \quad (1.15)$$

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

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT^1}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{KT^2}}\right)} \quad (1.16)$$

Stoks va antistoks chiziqlarining intensivliklari nisbati

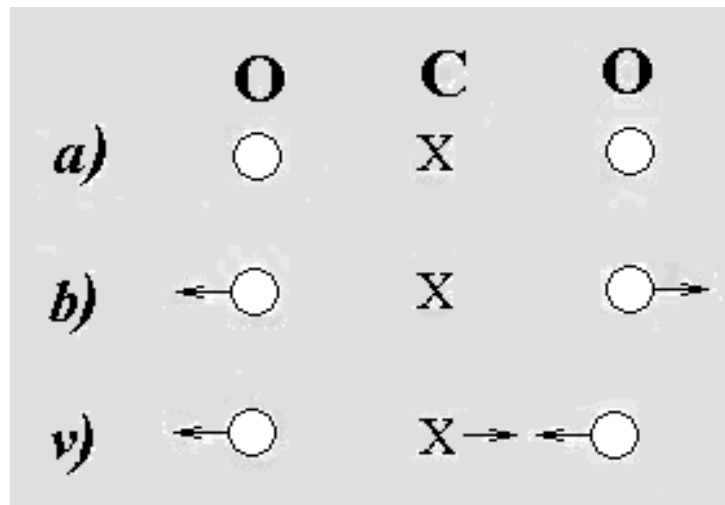
$$\frac{I_{ac}}{I_c} \approx \left(\frac{\nu_0 + \nu_{me\acute{a}}}{\nu_0 - \nu_{\acute{o} \acute{a}\acute{a}}}\right)^4 \quad (1.17)$$

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 ifodalash mumkin.

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

Masalan: $\tilde{N}\hat{I}_2$ molekulasida atomlar tebranganda ularning joylashishi shunday o'zgaradiki, bunda molekulaning qutblanuvchanligi ko'p o'zgarib, uning elektr momenti o'zgarmaydi, chunki kislorodning bir xil ishorali zaryadlangan ikki atomi (O) tebranish vaqtida uglerod zaryadidan ikki tarafga simmetrik joylashganicha qolaveradi.



1.5-rasm. $\tilde{N}\hat{I}_2$ molekulasida atomlar tebranishining xillari. a- atomlarning dastlabki vaziyatlari: b-qutblanuvchanlikni o'zgartiradigan tebranish: v-elektr momentini o'zgartiradigan tebranish

Boshqacha tebranish 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 kombinatsion sochilish chizig'i paydo bo'ladi, bu chiziqning chastotasini kombinatsion sochilish spektrida aniqlash mumkin; ikkinchi tur tebranishda chastotani infraqizil yutilish polosasining vaziyatiga qarab topish mumkin.

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

molekulyar dinamikning 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 tadbiq etish imkonini beradi. Kombinatsion sochilish spektrlari molekulalar uchun shunchalik xarakterlidir, bu spektrlar yordamida murakkab molekulyar aralashmalarni, ayniqsa ximiyaviy yo'l bilan analiz qilish qiyin, 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 sochilishi to'g'risida bordi. Yorug'likni atom yoki ionlar sochib yuborganda ham shunga o'xshash hodisa yuz beradi. Masalaning mohiyatiga tushunib yetish uchun atom holidagi gazlarda yorug'likning yutilishi va dispersiyasini o'rganish natijalarini esga olish kerak bo'ladi. Atomni ossillyatorlar to'plami deb qarash mumkin: bu ossillyatorlarning xususiy chastotalari atomning ixtiyoriy ikki kvant holatida energiyalari ayirmasi bilan aniqlanadi. Shuning uchun atomlar bilan molekulalar orasidagi farq faqat ossillyatorlar tabiatida bo'ladi: molekula bo'lgan holda ossillyatorlar yadrolar harakatini tavsiflaydi, atomlar holida esa ossillyatorlar elektronlar harakatini tavsiflaydi. 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 sochilishda ancha keyin topildi. Ionlarning kombinatsion sochilish hodisasi 1963 yilda atomlarning kombinatsion sochilish hodisasi 1967 yilda topildi. Yorug'likning kombinatsion sochilish hodisasini mumtoz fizika doirasida turib tushuntirib berish mumkin, lekin uning kvant talqini yorug'likni kvant tabiatini mohiyatan tasdiqlaydi. Molekulalar strukturasi, ichki molekulalar va molekulalararo kuchlarini o'rganishda, murakkab aralashmalarini tahlil qilish va u yoki bu birikmalarni identifikatsiyalash (ajratish)da kombinatsion sochilish usuli muhim anjomdir.

1.3. Molekulalararo o‘zaro ta’sir turlari

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 ko‘effitsiyenti, 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‘rsatatilgan.

1.1- jadval

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

Bugungi 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 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.

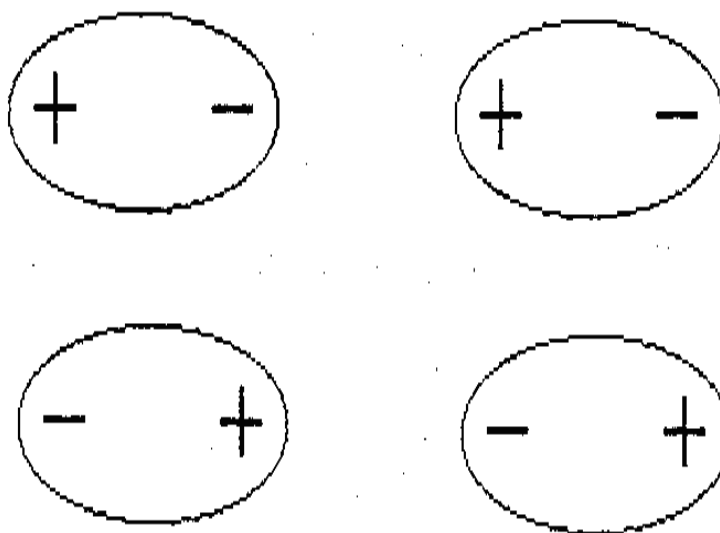
Bu kuch tabiatini uzoq vaqtlar tushuntirish qiyin bo'ldi. Qachonki atomlar orasidagi ta'sir kuchi tabiatini to'lig'icha o'rganilganidan so'ng, molekulalar orasidagi ta'sir kuchlari to'g'risida to'liq xulosaga kelishi mumkin. Odatda molekulalararo ta'sir kuchining energiyasi 0,5-1,5 kkal/mol tashkil etadi.

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

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

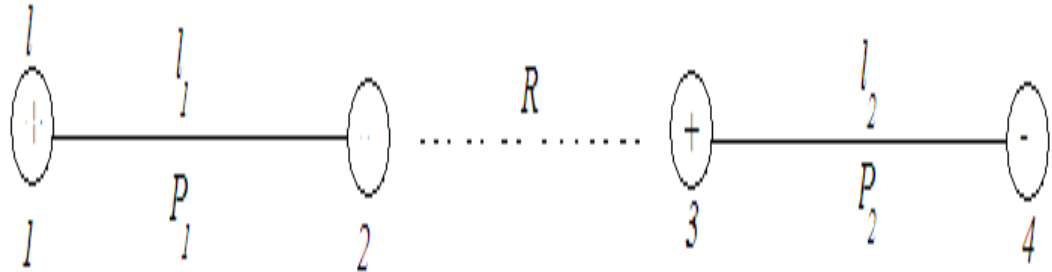
Bu kuchlar to'g'risida to'xtalib o'tamiz.

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. Qutblangan molekulalar

Natijada qarama–qarshi ishorali qutblar orasidagi 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.



1.6-rasm. Dipol sistemasi

Bu dipollar orasidagi masofa $R \approx l$ qanoatlantirsa bu sistemaning umumiy ta'sir energiyasi har bir zaryadlarning ta'sir energiyalaridan iboratdir, ya'ni

$$U = U_{13} + U_{14} + U_{23} + U_{24} =$$

$$= \frac{P_1 P_2}{\ell_1 \ell_2} \left[\frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} - \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 + \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 + \ell_2)} \right] \quad (1.18)$$

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

$$U = \frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} + \frac{1}{R} \right] = -\frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{2}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} \right] \quad (1.19)$$

(1.18)- va (1.19) tenglikka oddiy matematik almashtirishlar kiritib va $R \approx l$ ekanligini hisobga olsak oriyentatsion ta'sir energiyasi quyidagiga teng bo'ladi.

$$U_{\text{or}} = -\frac{2P^2}{R^3} \quad (1.20)$$

(1.20)-tenglikni chiqarishda biz molekulaning issiqlik harakatini hisobga olmadik. Bizga ma'lumki molekulaning issiqlik harakati uning oriyentatsiyasiga ta'sir etadi. Shunga mos ravishda uning oriyentatsion 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 E bo'lgan elektr maydoniga kiritamiz. Bu holda ta'siri natijasida

sistemada induksion dipol momenti P^1 sistemaning potensial energiyasi bilan quyidagicha bog'langan.

$$U = P^1 E \cos(P^1 E) \quad (1.21)$$

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

$$\cos(P^1 E) = 1 \quad (1.22)$$

Bu holda maydon kuchlanganligining qiymati 0- E ga o'zgaradi. Natijada oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymati quyidagiga teng bo'ladi.

$$U_{op} = - \int_0^E P^1 dE = - \int_0^E \alpha E dE = - \frac{\alpha E^2}{2} \quad (1.23)$$

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

$$E = \frac{\ell}{R^2} - \frac{\ell}{R^2 - 2R\ell} = \frac{2\ell R}{R^4 - 2R^3\ell} = \frac{2PR}{R^4 - 2R^3\ell} = \frac{2P}{R^3} \quad (1.24)$$

$$R \gg l \text{ e'tiborga olsak } E = \frac{2P^2}{R^3}$$

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

$$\alpha = \frac{P^2}{3KT} \quad (1.25)$$

(1.24) va (1.25) tenglamalarni (1.23) ga qo'ysak biz oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymatini topgan bo'lamiz.

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

$$U_{op} = - \frac{2}{3KT} \cdot \frac{P^4}{R^6} \quad (1.26)$$

Oriyentatsion ta'sir energiyasining qiymatini xarakterlaydi, temperatura oshishi bilan kamayadi. (1.26) dan ko'rinadiki oriyentatsion ta'sir energiyasining

qiymati temperaturaga hamda P^6 ga teskari proporsional bo'lib, dipol momenti P^2 ga to'g'ri proporsional.

Agar ta'sir etuvchi dipollarning dipol momenti o'zaro teng bo'lmasa ya'ni, $P_1 \neq P_2$ (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.

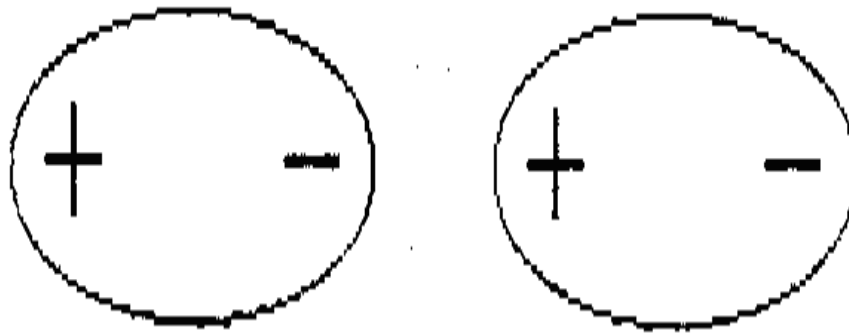
Induksion kuch. Bir-biriga yaqin joylashgan qutbli molekula bilan, ya'ni xususiy dipol momentiga ega bo'lgan molekula bilan qutbsiz molekula orasidagi ta'sir kuchi induksion kuch bilan xarakterlanadi.

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.

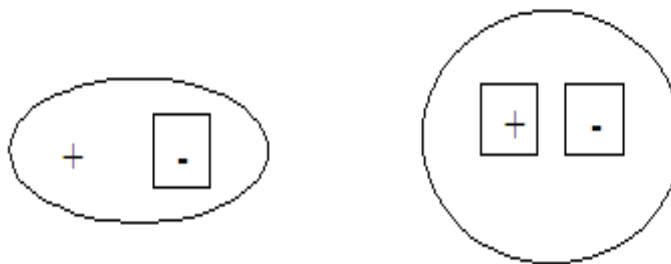
$$U_{un} = \frac{2\alpha_{un} P^2}{R^6} \quad (1.27)$$



1.7-rasm. Maydon ta'sirisiz



1.8-rasm. Maydon ta'siri ostida



1.9-rasm. Molekulalar induksiyasi

Induksion kuchni birinchi bo'lib Debay tekshirgan.

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 xosil qiladi deb qarash mumkin, bunday tebranish xosil qiluvchi sistemaga otsilyator deyiladi.

Atom va molekulalarning o'rtacha dipol momenti nolga teng bo'lganda elektronlarning tebranishi tufayli hosil bo'lgan otsilyatorning dipol momentining aniq qiymati noldan farqli bo'ladi. Shu tufayli otsilyatorlar o'zaro ta'sir etishadi. Atom va molekulalardagi vaqtning ma'lum bir paytda vujudga keladigan dipolga fluktatsion dipol momenti deyiladi.

$$U_{\text{duc}} = -\frac{h\nu \alpha^2}{2R^6}$$

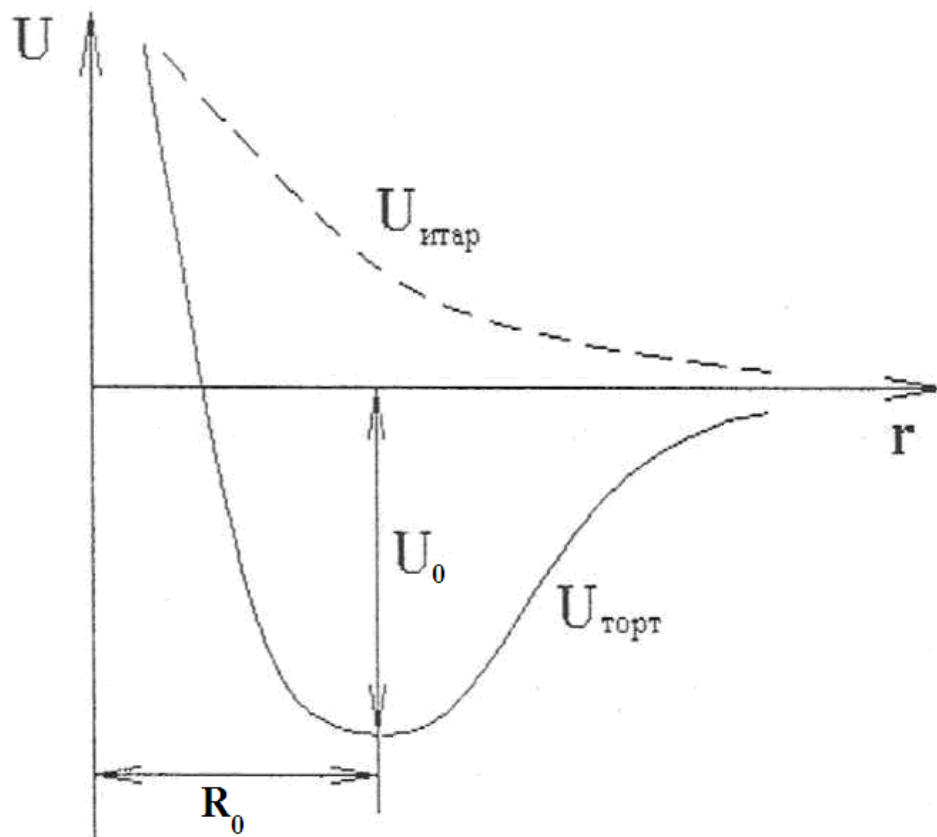
$$U_{\text{um}} = \frac{m}{R^{12}}$$

m- itarishish kuchlarining doimiyligi deyiladi.

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

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

Bu formulaning grafigi quyidagi ko'rinishga ega.



1.8-rasm. Lenard-Djons formulasining grafik ko'rinishi

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

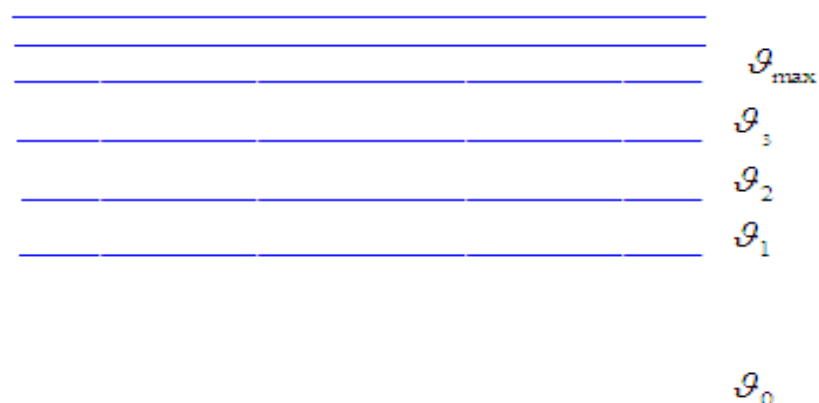
Quyidagi 1.2 jadvalda ba'zi moddalar uchun oriyentatsion, induksion, dispersion, kuchlarning ulushlari keltirilgan.

1.2 - jadval

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

1.2-jadvaldan ko'rinadiki dipol momenti katta bo'lgan joyda dispersion o'zaro ta'sirning ulushi ko'proq bo'ladi. Spetsifik kuchlar faqatgina ba'zi suyuqliklarga va ba'zi molekulalarga hos bo'lgan kuchlar hisoblanadi [12].

Energetik holatlar kontinumi. Spektroskopik metodlar yordamida molekulalarning energetik parametrlari yoki valentli bog'lanishlarning mustahkamligini aniqlash katta ahamiyatga ega. Bizga ma'lumki angarmonik tebranma harakatlarga tegishli bo'lgan spektral chiziqlar yoki bu chiziqlarga to'g'ri keluvchi energetik holatlar tebranish kvant soni ϑ ning qiymati oshib borishi bilan energetik holatlar zichlashib boradi.



1.11- rasm. Spektral chiziqlar energetik holati

Agar biz eksperiment yo‘li bilan $h\nu_D$ ni topa olsak, ν_D bu $\Delta E=0$ bo‘lgan nuqta ν_D bevosita molekulaning disosatsiya energiyasini xarakterlaydi. Energetik holatlarning tutashib ketgan joyiga energetik holatlar kontinumi deyiladi.

Kontinum sohani aniqlash bilan energiyaning disosatsiya sohasini aniqlash mumkin. Ba’zi hollarda kontinum chegarani topish uncha oson bo‘lmaydi. Bunday vaqtda disosatsiya energiyasi D ni aniqlash uchun quyidagi formulani bilish shart.

$$\mathcal{G}^* = \mathcal{G}_0 (1 - 2x)$$

$$\mathcal{G}_1^* = \mathcal{G}_0 (1 - 3x)$$

$$\mathcal{G}_2^* = \mathcal{G}_0 (1 - 4x)$$

$$X = \frac{h\nu_0}{4D}$$

Asosiy ton va obertonlarning chastotasi hisoblanib, $X = \frac{h\nu_0}{4D}$ formuladan disosatsiya energiyasini hisoblash mumkin. Ba’zi hollarda absolyut disosatsiya energiyasi emas, balki nisbiy disosatsiya energiyalari hisoblanadi. Nisbiy disosatsiya energiyasini hisoblash uchun ta’sir kuchlarning elastiklik doimiyligini K bir-biriga solishtiriladi (yoki ximiyaviy bog‘lanishlarning bir-biriga solishtirish mumkin).

$$K = 4\pi^2 \nu^2 \frac{m_{N_1} - M_{N_2}}{m_{N_1} + M_{N_2}}$$

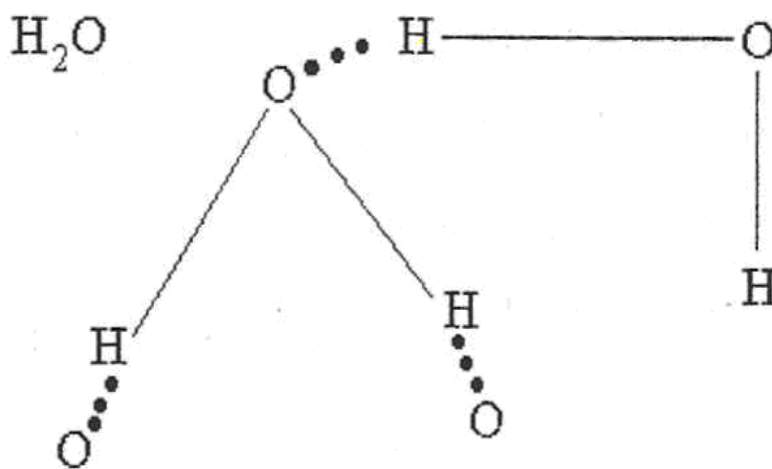
K bilan orasida aloqadorlik mavjud.

$$\begin{cases} C - C \\ C = C \\ C \equiv C \end{cases} \quad \text{bog‘lanishlar uchun } K \quad K_{C-C} : K_{C=C} : K_{C \equiv C} = 1 : 2 : 4$$

Shuning uchun ham K ning qiymatini hisoblagandan keyin ximiyaviy bog‘lanishlar mustahkamligi haqida ma’lumot olish mumkin.

1.4. Vodorod bog‘lanish va uning tabiati

Vodorod bog‘lanish o‘ziga xos bog‘lanish bo‘lib, bunday bog‘lanishlar quyidagi hollarda $F, O, N, Cl, Br, \dots$ lar bilan bog‘langan biron molekula tarkibidagi H atomi boshqa molekula tarkibidagi shunday atomlar bilan bog‘lanish hosil qilsa unda vodorod bog‘lanish deymiz.



1.12-rasm. Vodorod bog‘lanish

Vodorod bog‘lanish jarayonida go‘yoki H atomning 2 valentli xususiyati namoyon bo‘ladi. Vodorod bog‘lanishni moddaning hamma agregat holatlarida kuzatish mumkin. Vodorod bog‘lanish o‘zining energiyasi jihatdan kovalent bog‘lanishdan kichik. Agar kovalent bog‘lanishlar energiyasi $100 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ ga teng bo‘lsa, Van der Vals bog‘lanishlarining energiyasi $3 \div 10 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ ba’zi hollarda $30 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ ga teng. Vodorod bog‘lanish tufayli suyuqliklarning sindirish ko‘rsatkichi, zichligi, yopishqoqligi, qaynash temperaturasi, kristallarning erish temperaturasi va hakozo o‘zgaradi.

Masalan: suvda vodorod bog‘lanish bo‘lmaganda uning erish temperaturasi - 100°C , qaynash temperaturasi $+80^{\circ}\text{C}$ bo‘lishi kerak edi. Vaholanki bu raqamlar mos ravishda 0°C va 100°C ga teng.

Vodorod bog‘lanish ikki xil bo‘lishi mumkin. Agar vodorod bog‘lanish tufayli bir molekulaning ikki qismi orasida bog‘lanish bo‘lsa bunga tashqi bog‘lanish deyiladi yoki molekulalararo bog‘lanish deyiladi. Infraqizil yutilish va kombinatsion sochilish spektrlari vodorod bog‘lanishga juda sezgirdir. Masalan: Xinolin suyuqligini spirtga eritsak xinolindan H atomi spirtidagi $O-H\dots H$ bog‘lanish hosil qiladi.

Xinolinning qutblangan kombinatsion sochilish spektrining bo‘linishiga olib keladi yoki vodorod bog‘lanish bo‘lgan suyuqlikda (eritmada) Releycha anizotrop sochilish spektrining yarim kengligi torayadi. Bu torayish eritmada eritilgan molekulaning harakatchanligi pasayishidan dalolat beradi. Umuman olganda hozircha vodorod bog‘lanish nazariyasi yaratilgan emas.

Releycha va kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektriga tashqi sharoitgining ta’siri (P , T)

Umuman molekulalar spektrlar mikro va makro parametrlarning o‘zgarishiga juda ham sezgir. Ayniqsa molekulalarning issiqlik harakatiga ikkita mikroparametr T va P ning ta’siri har doim sezilarli bo‘ladi. P ning oshishi bilan suyuqliklarning yopishqoqligi oshib boradi. Bular hammasi Releycha va kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektrlarida YAMR larida yaqqol namoyon bo‘ladi.

Bu tajribani quyishdan asosiy maqsad morfolin va uning suvli aralashmasida kimyoviy bog‘lanishlarning bir turi vodorod bog‘lanishni (H -bog‘lanishni) spektroskopik namoyon bo‘lishini tekshirishdan iborat edi. Ma’lumki kimyoviy elementlarning atomlari uzaro birikib, juda ko‘p oddiy va murakkab moddalarning molekulalarini hosil qiladi. Bunday molekulalarda atomlar bir-biri bilan qanday kuch hisobiga bog‘lanib turadi degan savol to‘g‘iladi. Normal sharoitda inert gaz (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) larning atomlari erkin holda mavjud bo‘la oladi, boshqa har qanday element atomlari erkin holda mavjud bo‘la olmaydi. Ular bir-biri bilan

birikishga harakat qiladi. Natijada esa oddiy yoki murakkab moddalarni hosil qiladi. Xaar qanday kimyoviy element o'zining tashqi energitik sahda elektronlar sonini tugallangan holatga yetkazishga intilishini kimyo fanidan yaxshi bilamiz. Inert gazlarning tashqi inergitik sathida esa elektronlar soni tugallangan bo'ladi [12].

Har bir element o'zining tashqi energitik sathidagi elektronlarning yadroga bog'lanish energiyasi bilan farqlanadi. H -bog'lanish elektromanfiylik tushunchasi muhim o'rin tutadi. Masalan ftor F atomining tashki elektron satxida 7 ta elektron bor. Kimyoviy reaksiyalarda elektron qabul qilib olib, tashqi elektron sathidagi elektronlarni 8 taga yetkazib to'ldirib oladi.

Ayni element atomining boshqa element atomidan elektronlarini tortib olish xususiyati elektromanfiylik deyiladi.

Elektromanfiyligi eng yuqori bo'lgan element ftordir. Seziynigi eng kichikdir. H -bog'lanish kimyoviy bog'lanish turiga kirib ichki molekulyar va molekulalararo bog'lanish bo'lishi mumkin.

XIX asrning oxirlarida M.A.Ilinskiy kislorod yoki azot bilan birikkan vodorod boshqa atom bilan ham birika olishini ya'ni vodorodda asosiy valentlikdan tashqari qushima valentlik ham borligini aytib bu hodisani nazariy jixatdan asoslagan edi. H -bog'lanish orqali ikki atom yoki ikki molekula bir-biri bilan bog'lanishi mumkin. H -bog'lanish hosil bo'lish mexanizmini N.D.Sokolov kvant mexanika nazariyasi asosida izoxlab bergan. Vodorod elektromagnit manfiyligi yuqori bo'lgan elementlari: F, Cl, O, N bilan birikkanda H -bog'lanish hosil bo'ladi. H -bog'lanish kuchsiz, uning energiyasi $5 \div 7 \text{ kkal/mol}$ atrofida bo'ladi va H -bog'lanishni moddaning barcha agregat holatlarida uchratish mumkin. Misol tariqasida suyuq holatdagi suvni qarash mumkin. Suvni har bir molekulasidagi H -atomi ikkinchi molekuladagi kislorod atomi bilan qushimcha bog'langan [13-15].

Buning natijasida suv molekulalari bir-biri bilan bog'lanib, yirikroq zarralarni hosil qiladi. Ularni $(H_2O)_n$ formula bilan ko'rsatish mumkin.

($n = 2, 3, 4 \dots$) bu zarralar ichida eng barqarori $(H_2O)_2$ dir $(H_2O)_2$ ning struktura formulasi quyidagicha yozilcha bo'ladi.

Suyuqliklarda ko'p tarqalgan assotsiyatsiya birikib, yirikroq zarracha hosil qilish hodisasining sababi H -bog'lanishdir deyish mumkin. H -bog'lanishning kelib chiqishi vodorod atomining tabiatiga bog'liqdir. H -atomi o'zining bir elektronini yo'kotganda vodorod atomi yadrosiga aylanadi. Vodorod ioniningt elektron qavati bo'lmagani uchun boshqa ionlarning elektronlari uning yaqinlashishiga qarshilik qilmaydi. Shu sababli vodorod ionii boshqa atomlarning elektron qavatiga yaqinlashadi va ichiga kira oladi. H -bog'lanish yuqorida aytganimizdek uncha mustaxkam emas. Kimyoviy bog'lanish mustaxkamligi shu bog'lanishni tamomila uzish uchun kerak bo'ladigan energiya bilan o'lchanadi. Bu energiya bog'lanish energiyasi nomi bilan yuritiladi [16-19].

II. Bob. Tajriba olish texnikasi va usullari

2.1. DFS-52 spektrometri va uning ishlash usuli

DFS-52 spektrometri lazer yordamida suyuq, kristall, gaz, polikristall moddalarda kombinatsion sochilish spektrini olish va qayd qilish uchun mo'ljallangan. Shuningdek, bu spektrometr molekulyar spektroskopiya sohasida fizika-ximiyaviy tekshirishlar, ya'ni suyuqliklar (loyqa), suv aralashmalari, kristallar, plyonkalar va kraskalar tarkibi va tuzilishini o'rganishda ishlatilishi mumkin.

Spektrometrning tarkibi: Spektrometrning tarkibiga almashtiruvchi difraksion panjarali qo'shaloq, chastotametr va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluvchi qurilma, ERU-53, termoelektron sovutgichli blok pitaniyasi, alfavit raqamli va yozuvchi ko'rilma (programmani tayyorlash sistemasi) 15 IPG-32-003 ga kiruvchilar, laboratoriya o'zi yozuvchi asbobli LKS-4-003, ulash simlar va o'tkazgichlar komplekti, almashtirish va ehtiyot qismlari kiradi.

Ishlash prinsipi: Tekshirilayotgan namunali monoxromatik yorug'lik bilan nurlantirganda sochilgan yorug'likning spektrida chiziqlar (kombinatsion sochilish chiziqlari) kuzatiladi. Bu chiziqlarning chastotasi namunaga tushayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasi kombinatsiyadan iborat bo'ladi.

Kombinatsion sochilish spektrining intensivligi kichik bo'lib, ularni qayd qilish uchun yorug'likni ham sochuvchi monoxromatorlardan foydalanish zarur. Shuningdek, shovqini kam yetarlicha stabil bo'lgan qayd qilishning sezgir sistemalaridan foydalanish kerak.

DFS-52 spektrometrida uyg'otuvchi manba sifatida seriyali lazerlar ishlatiladi. Spektrni tekshirish uchun yorug'likni kam sochuvchi difraksion panjarali qo'shaloq monoxromatordan foydalaniladi. Spektrni qayd qilish sovitib turiladigan fotoelektron ko'paytirgich yordamida amalga oshiriladi. Hisoblash qurilmasi spektrlarning ketma-ketligi va spektral qayd qilishni, olingan natijalarning matematik qayta ishlashni va natijalarini qayd qiluvchi asbobga chiqarishni ta'minlaydi.

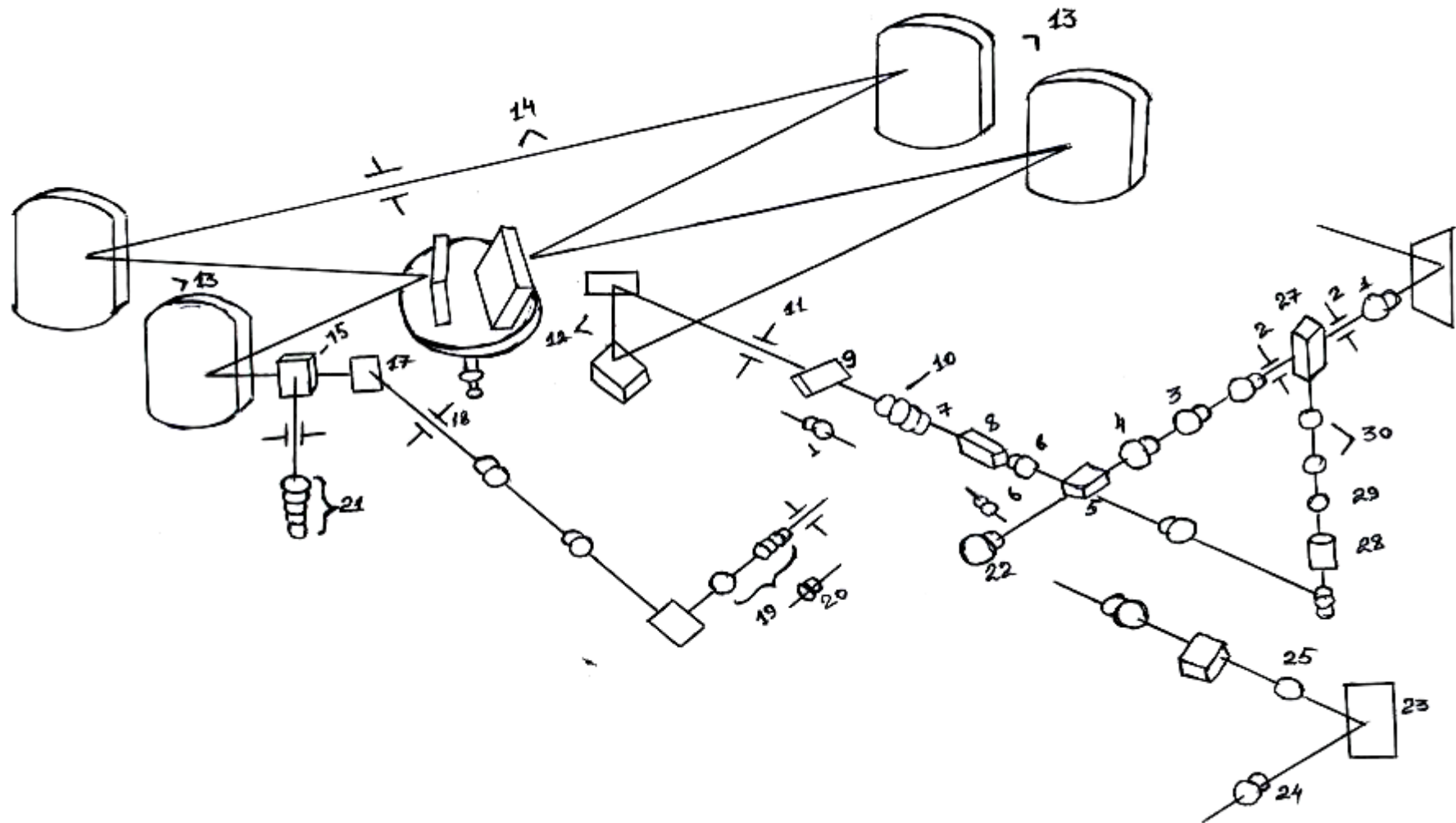
Optik sxema: Spektrometrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qo'shaloq monoxromator va qabul qiluvchi qurilma elementlaridan iborat. Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishini ta'minlaydi, namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qo'shaloq monoxromatorning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

Qo'shaloq ko'zguni monoxromator almashtiruvchi difraksion panjaraga ega bo'lib, u uyg'otuvchidan 20 sm^{-1} masofada 8 dan $25 \text{ sm}^{-1} \text{ mm}$ gacha teskari chiziqli dispersiyani ta'minlaydi (sochilgan nur uyg'otuvchining 10^{-7} qismi (intensivlikning) dan katta bo'lganda).

Qabul qilish blokining qayd qilish kanaliga o'rnatilgan obyektiv 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 nurlanishining bir qismini uzatadi.

Yoritish sistemasi va qabul qilish bloki bo'lgan qo'shaloq monoxromator yorug'likning kombinatsion sochilishi uchun, spektrni olish va uni elektr signallariga aylantirish (sochilish spektrida energiyaning taqsimlanishini xarakterlovchi) uchun mo'ljallangan. Spektrometrning optik sxemasi 2.1-rasmda keltirilgan. Yorug'lik manbaidan chiqqan parallel nurlar dastasi tor yo'lni interferensiyalar yorug'lik filtrida 1, diafragmadan 2, qutblanuvchi plastinkadan $3\left(\frac{\lambda}{2} \text{ yoki } \frac{\lambda}{4}\right)$ va almashtiriluvchi obyektivlarda 4 biri orqali namuna 5 tekisligiga fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish linzalardan biri orqali proyeksiyalovchi sistemada to'planadi va parallel dasta bo'lib obyektivga (7) yo'naladi. Linza va obyektiv (7) da iborat proyeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qo'shaloq monoxromatorning kirish tirqishida oldida, 2.3 yoki 3.5 marta kattalashtirib beradi.

Linza bilan obyektiv (7) orasida parallel nurlar dastasiga prizma analizator (8) qo'yilishi mumkin. Monoxromatorning obyektivi (13) sifatida parabolasion ko'zgular ishlatiladi. Difraksion panjaralar (14) almashtirilishi mumkin. To'lqin uzunligining 400-600 nm diapazonidan 1 nm da 1000 ta chizig'i bo'lgan panjaralar



2.1-rasm. DFS-52 spektrometrning optik sxemasi

ishlatiladi. Chiqishdagi buruvchi 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 obyektiv (21) asbobning qorachizig'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 moddadan qayta o'tishini ta'minlaydi. Ko'zgu (23) yorug'lik dastasining namunadan kuzatish yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalishida sochilgan qismidan foydalanishini ta'minlaydi.

Namunalar bilan ishlash uchun buruvchi prizma (25) va qisqa fokusli linza (26) ishlatiladi. Bular lazer nurini kukun yoki suyuqlik uchun mo'ljallangan idishga proyeksiyalaydi. Plastinka (27) lazer nurini (28) ko'rinishga uzatadi. Yorug'likning o'tkazgich orqali nurlanishi taqqoslash qabul qiluvchisiga uzatiladi.

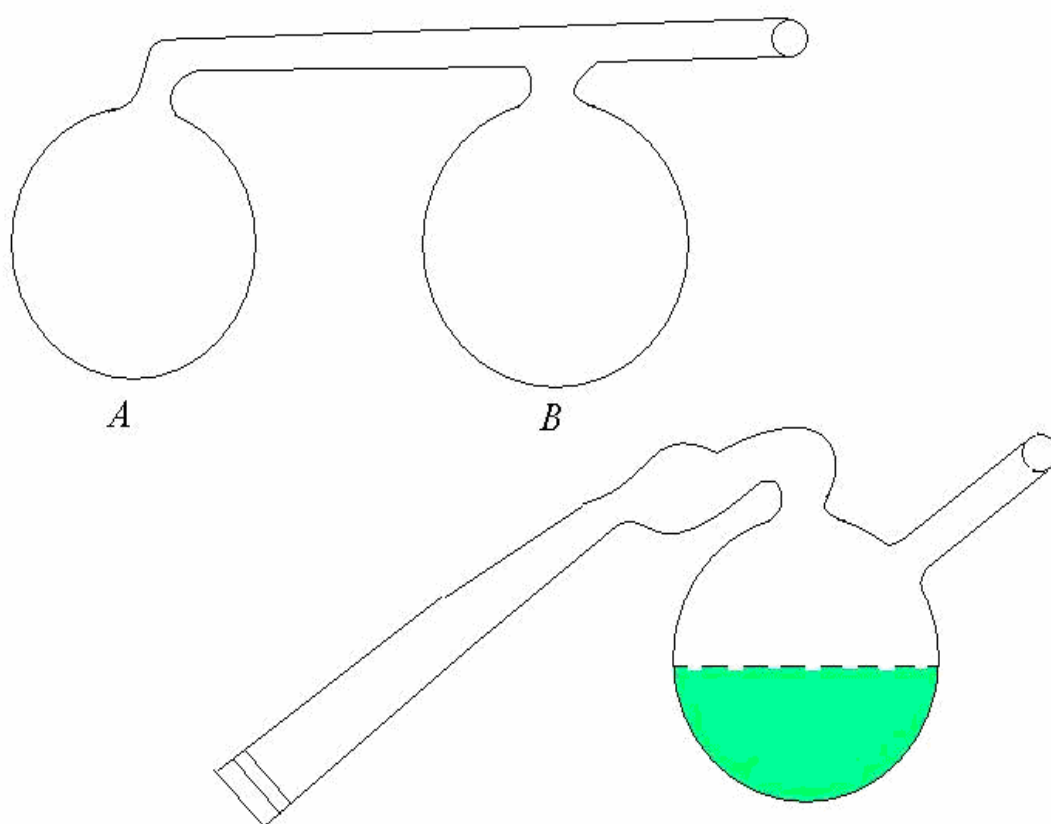
2.2. Qaralayotgan moddaning fizik, ximik xossalari va amaliy ahamiyati

Bu ishda biz pirrola molekulasiining tebranish chiziqlarini qayd qildik. Bu o'rganilayotgan moddaning bir necha marta haydash yo'li bilan chang zarralari va boshqa aralashmalardan tozaladik, maqsad ozgina aralashma ham molekulyar sochilishdan chetlanishga olib kelishi mumkin. Obyektlarni eksperimentga tayyorlash uchun o'sha tekshirilayotgan na'muna toza bo'lishi kerak, chang va boshqa aralashmalardan holi bo'lishi kerak. Tekshirilayotgan modda ximiyaviy tarkibi jihatdan ham tozalangan bo'lishi kerak. Tekshirilayotgan modda ximiyaviy tarkibi jihatdan ham tozalangan bo'lishi kerak.

Tozalash vakuum ostida qayta haydashdan iborat bo'lib, ikkita bir-biriga ulangan sharikdan iborat (2.2-rasm) keyin shariklardan biri modda bilan birga Vud trubkasiga ulanadi yana qayta haydash yo'li bilan Vud trubkasigi o'tkaziladi. Eng avval qayta haydash yo'li bilan moddani tozalashdan oldin shariklar va Vud trubkasi distillangan suv bilan yoki xrolepik bilan toza yuvilib, spirt bilan chayilgandan so'ng quritish shkafida quritiladi. Tekshirilayotgan modda ikkita bir-biriga ulangan shariklardan biriga solinadi keyin sharikdan biri Vud trubkasiga ulanadi. Ulangandan keyin shariklardan biri, ya'ni tekshirilayotgan modda solingan sharik pechkaga solinadi va ma'lum bir qaynash temperaturasiigacha qizdiriladi.

Natijada qizdirilayotgan shariklardagi modda tarkibidagi chetlasha boshlaydi, ya'ni o'sha aralashmalar bug'lanib, shariklardan biriga o'tib ketadi. Eksperimentga tayyorlanayotgan moddani shu yo'l bilan bir necha marta tozalanadi va nihoyat toza modda shariklardan birida o'zi alohida holicha qoladi. A sharikka suyuqlik quyilib uglekisloti yordamida yoki quruq muz yordamida yaxlitlanib, atkacha qilinadi, ya'ni havosi so'rib olinadi. Vakuum hosil qilingandan so'ng C nuqtasi kavsharlanadi va pechkaga qo'yilib qayta haydaladi. A sharik qayta haydalgan suyuqlik bilan kesib olinib, Vud trubkasiga ulanadi. Vud trubkasiga ulangandan keyin yana qayta haydash yo'li bilan yana tozalanadi va

tozalangandan keyin Vud trubkasiga o'tkaziladi. Vud trubkasiga o'tkazilgandan keyin $\ddot{A}$ nuqtadan kesib olinib, Vud trubkasiga qora bo'yoq bilan bo'yaladi. Vud trubkasining tag qismi bilan yonbosh qismchalardan tashqari hamma tomoni bo'yaladi, maqsad boshqa tomonlarga sochilgan yorug'lik to'liq yutilishi uchun. Yuqorida aytilganlar bajarilgandan so'ng Vud trubkasi eksperimentga tayyor hisoblanadi. Moddani eksperimentga tayyorlashda qo'llaniladigan qurilmaning ko'rinishi 2.2-rasmda tasvirlangan [20, 21].



2.2-rasm. Vud trubkasi

2.3. Moddani eksperimentga tayyorlash

Ma'lum kombinatsion sochilish spektrining sifati va foydali signalning fanga yaxshi munosabatini olish moddani tayyorlashga ko'proq bog'liq.

Moddani oldindan tayyorlash, xarakterli o'lchash uchun yaroqli spektrni olish zarur bo'lgan kuyidagi asosiy talablar bilan aniqlanadi.

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

b) modda fluoressensiya bermaydigan bo'lishi kerak. Ko'p hollarda tozalanmagan suyuqliklarda oz miqdordagi aralashmalar borligi tufayli kelib chiqadi. Fluoressensiya natijasida spektrni kuzatishga ayniqsa tekshirilayotgan moddaning kam miqdorini o'lchashga xalaqit beradigan kuchli fon kelib chiqadi.

v) modda iloji boricha rangsiz bo'lishi kerak. Hamma tekshirilayotgan moddalar "XCH" yoki "CHDA" markazda olingan, keyin qo'shimcha tozalangan bo'lishi kerak.

Suyuqlik oldindan fosfor besh oksidi yordamida quritiladi. Suv miqdori fonning kuchayishiga va kombinatsion sochilish chizig'ining yoyilib ketishiga olib keladi.

Binar aralashmalar konsentratsiyasi eritilgan (aralashtirilgan) modda molekulalarining sonini erituvchi modda molekulalarining soniga nisbati bilan o'lchanadi. (Nisbiy mol tarkib)biror aralashmalari solishtirishni osonlashtirish uchun nisbiy mol tartibni eritilgan modda va erituvchi hajmlarni nisbati orqali ifodalash mumkin.

Konsentratsiyada ya'ni eritilgan modda molekulalarining soni eruvchi m molekulaga teng bo'lgan konsentratsiyada nisbiy nol tarkibini moddalar hajmlarining nisbati orqali quyidagicha ifodalash mumkin.

$$\frac{M_A \alpha_B}{m_B \alpha_A} = \frac{V_A}{V_B} \quad (2.1)$$

Bu yerda M_A va m_B eritilgan modda va erituvchining molekulyar og'irliklari α_A va α_B ularning zichliklari, V_A va V_B hajmlaridir.

Bu formuladan ko‘rinadiki, istalgan konsentratsiyasini (mol) mol eritilgan modda hajmining erituvchi hajmiga nisbatan ifodalash mumkin.

Idishni to‘ldirish va konsentratsiyani olish uchun shpritsdan foydalaniladi. Bunday oddiy qurilma zarur konsentratsiyani yetarlicha tez va aniq tayyorlashga imkon beradi.

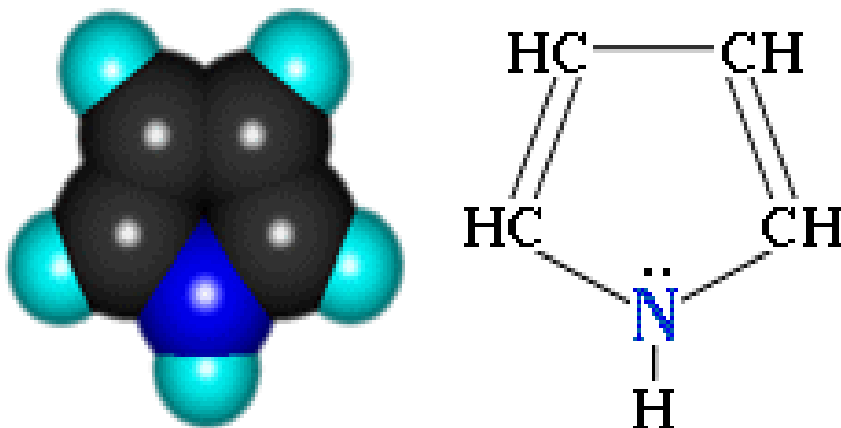
2.4. Natijalar va kvanto-ximik hisoblashlar xatoligi

Kondensirlangan sistemaning optik xususiyatlarini spektroskopik o'rganishga har doim katta e'tibor qaratilgan. Chunki, bunday tadqiqotlar, kondensirlangan muhitning tuzilishi, strukturasi va xossalari haqida qimmatli ma'lumotlarni beradi. Moddaning suyuq holatini tushuntiradigan nazariyani rivojlantirish fanning fundamental muammolaridan biridir. Shu sababli suyuq holatdagi modda va eritmalarining muammolarini yechilishi molekulyar fizikaga tegishlidir. Bu bobda Pirrola molekulasining kombinatsion sochilish spektri eksperimental tadqiqi va kvanto-kimyoviy raschyoti (hisoblashlar) keltirilgan.

Eksperiment DFS-52 spektrometrida, yorug'lik manbai sifatida to'lqin uzunligi $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ bo'lgan Argon lazeridan foydalanib o'tkazildi.

Avvalo biz pirrola molekulasining tuzilishi va xossalariga to'xtalib o'tsak.

Pirrola – aromatlangan, C_4H_5N - 5-a'zoli geterotsikli azot bo'lib, u quyidagi tuzilishga ega.



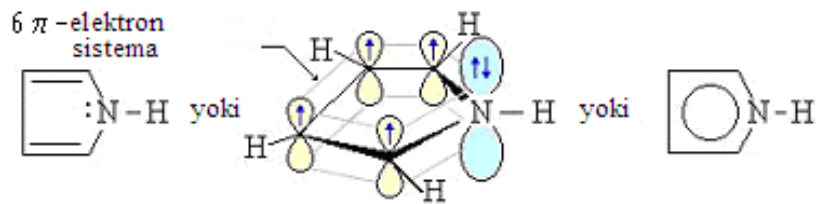
2.3-rasm. Pirrola molekulasining tuzilishi

Asosan suyak yog'ida (suyakni quruq haydash orqali olinadi), yana toshko'mir smolasida mavjud bo'ladi [22].

Pirrol halqa o'simliklarning porfirin – xlorofilida, gemalobin, sitoxrom va boshqa bir qancha muhim birikmalarning tarkibiga kiradi.

1870 yilda pirrol tuzilishini birinchi bo‘lib Bayer taklif etdi, 1834 yil Runge pirrol molekulasining toshko‘mir smolasida xrom kislotasini maleinimidda oksidlash va suksinimidni rux changida quruq haydash orqali qayd qilgan.

Pirrola molekulasining elektron tuzilishi uning kuchsiz kislota va aromatik bog‘lanishi xossalarini tushuntiradi. Uglerod va azot atomlari sp^2 -gibrid holatida joylashgan.



2.4-rasm. Pirrola molekulasining tuzilish

δ -bog‘lanish $C-C$, $C-H$ va $C-N$ larga bog‘liq ravishda orbitasi yassi gibrid sikl tuzilishga ega.

Gibridlanmagan azotning p -orbitasida ajralmas elektron juftligi joylashgan bo‘lib, uglerod atomining 4 ta p elektroni bilan o‘zaro birikadi. Shunday qilib bu birikishi natijasida siklik sistemada 6 ta elektron joylashadi, bu pirrolaning aromatik xossasini aniqlab beradi.

Kuchli mineral kislotalar ta’sirida pirrol polimerlash reaksiyasiga kirishadi[22].

2.5. Olingan natijalar va ularning tahlili

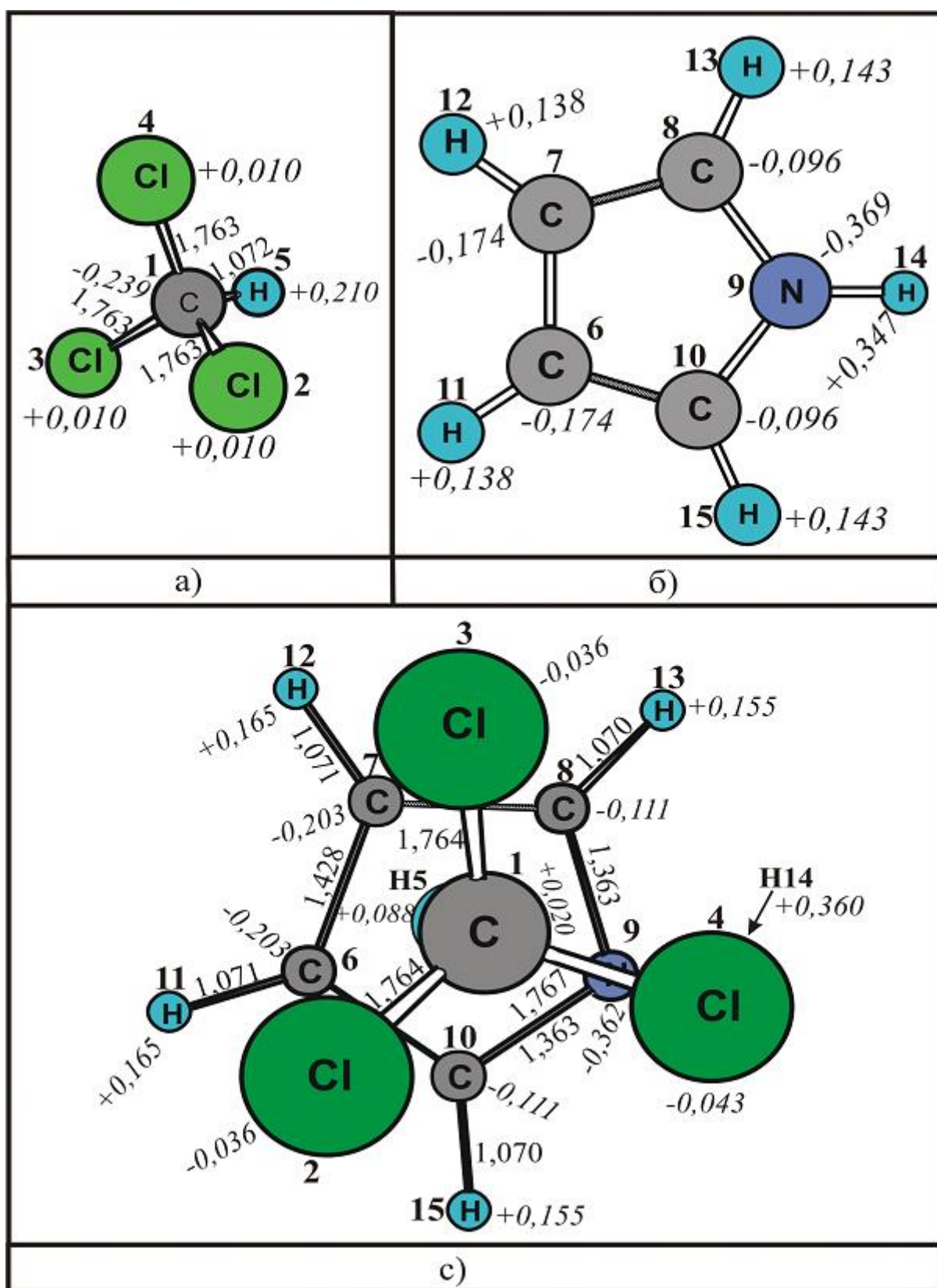
Pirrolaning molekulalararo o‘zaro ta’siri uning protonodonor va neytral erituvchilardagi aralashmalarining kombinatsion sochilish spektri o‘rganilganda qo‘yidagilar ma’lum bo‘ldi. Pirrol toza suyuqliklar va protonodonor erituvchilar molekulalari bilan molekulyar agregatlar hosil qilish mumkin. Bunda molekulyar agregatsiya mexanizmi va agregatlar tuzilishi noaniqligicha qoladi. Bu holatda kvanto-kimyoviy hisoblashlardan foydalanib, agregatning tuzilishi va xloroform, pirrola molekulalarining o‘zaro ta’sir mexanizmi to‘g‘risida bir qancha savollarga aniqlik kiritildi [23, 24].

Kvant-kimyoviy hisoblashlar tanlangan Gauss (Gaussian 98) funksiyasida 6-31G++(d,p) RHF yaqinlashishida pirrolaning izolyatsiyalangan monomer molekulalari, xloroform va pirrol xloroform dimer agregatlari uchun o‘tkazildi [25].

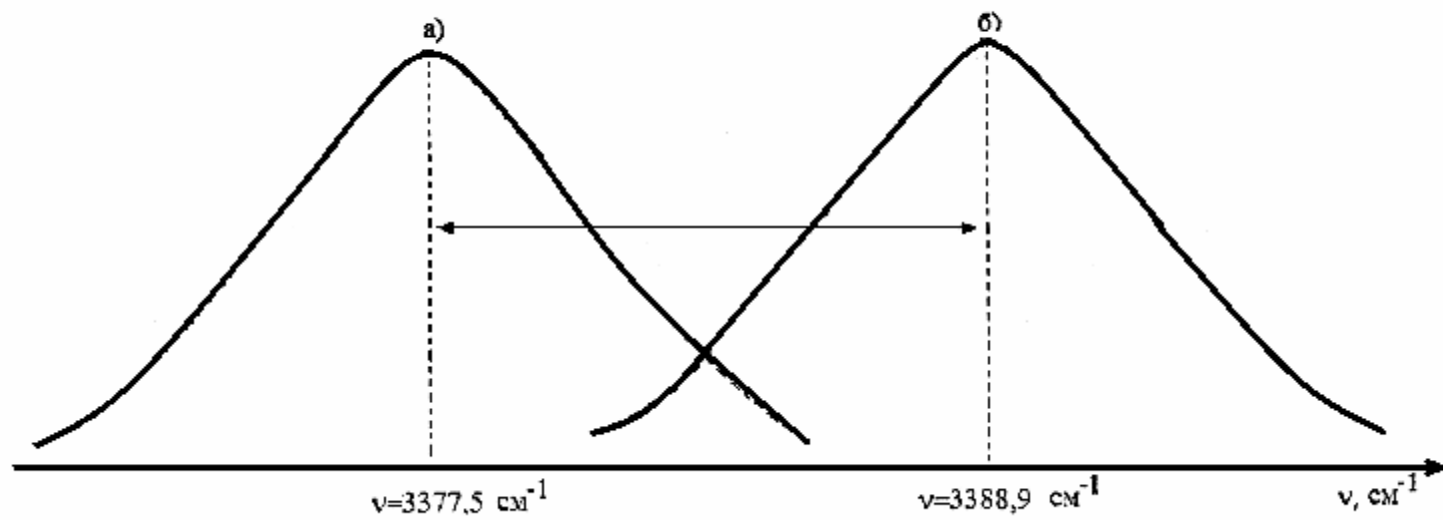
2.4-rasmda xloroform monomeri va pirrol-xloroform dimer agregatlari tuzilishi ko‘rsatilgan. Xloroform molekulalari pirrol halqasining taxminan o‘rtasida vodorod atomi $C-H$ xloroform guruhida oriyentatsiyalanadi. Bu vodorod atomida halqadagi qo‘shni molekula atomigacha bo‘lgan masofasi qo‘yidagi qiymatga ega bo‘ladi.

$$\begin{aligned} H^5 - C - 2,921 \text{ \AA}, \quad H^5 - C^7 - 2,922 \text{ \AA}, \quad H^5 - C^8 - 2,969 \text{ \AA}, \\ H^5 - C^9 - 2,988 \text{ \AA}, \quad H^5 - C^{10} - 2,969 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Vodorod atomi bu holda C^7 va C^6 atomlariga yaqin joylashadi. Molekulalarning bunday oriyentatsiyasi shu bilan bog‘liqki $C-H$ gruppadagi vodorod atomi halqadagi qo‘shni molekuladagi π – elektronlari bilan o‘zaro ta’sirlashadi, bundan tashqari sterik faktorlarning ta’sir doirasiga ega bo‘ladi. Dimer molekulasidagi o‘zaro tebranishlari $20-70 \text{ sm}^{-1}$ sohada joylashgan polosalarga mos keladi (aniqrog‘i $17,7; 26,8; 27,5; 53,7; 57,8$ i $67,2 \text{ sm}^{-1}$).



2.5-рasm. а) xлороформ мономери ($\text{C Cl}_3\text{H}$), б) пирролмономер ($\text{C}_4\text{H}_5\text{N}$),
 c) пиррол-хлороформ димер агрегати



2.6-rasm. Xloroform molekulası C-H tebranishi
 a) monomer;) dimer holida

Pirrol halqasida joylashgan π – elektronlarning aktivligi hisobiga pirrolaning o‘zida dimer agregatsiyasi hosil bo‘ladi. Bu pirrol-xloroform dimerini o‘lchash natijasida tasdiqlanadi. Pirrola dimeri holatida xloroformning vodorod atomi yuqorida aytilgandek taxminan pirrola halqasi o‘rtasida oriyentatsiyalanadi.

Xloroform monomer molekulasida $C-H$ tebranishlari qo‘yidagi hisoblashlar bo‘yicha $3377,5\text{ sm}^{-1}$ polosaga to‘g‘ri keladi, (2.6-rasm) (eksperimental qiymati 3019 sm^{-1}) dimer agregatda $3388,9\text{ sm}^{-1}$ to‘g‘ri kelib, $C-H$ polosasining yuqori chastota tomon 11 sm^{-1} ga siljiydi [26-28].

Bu yerda xloroformning benzol bilan o‘zaro ta’sirlashish jarayonida o‘xshashlik mavjud. Bu eritmada shuningdek xloroform – benzolning demir agregatsiyasi uchun joy bor. Vodorod atomi molekulalari benzol halqasi markazida oriyentatsiyalanadi. Xlor atomlari esa benzol atomi bilan 3 ta tekislik bo‘yicha juft-juft joylashadi. Xloroformdagi S-N tebranishlari uchun aralashmada benzol bilan birgalikda $12,5\text{ sm}^{-1}$ yuqori chastota tomon siljishga egadir. Xloroform-pirrol dimer hosil bo‘lish energiyasi $2,5\text{ kkal/mol}$. Xloroform molekulasi atomlari orasidagi masofa xloroform-benzol dimerida quyidagicha:

$$\begin{aligned} H^5-C^1 &- 1,072\text{ \AA}, & CI^2-C^1 &- 1,764\text{ \AA}, \\ CI^3-C^1 &- 1,764\text{ \AA}, & CI^4-C^1 &- 1,767\text{ \AA} \end{aligned}$$

Bir vaqtda xloroform monometrida bu masofa mos holda

$$1,072\text{ \AA}; 1,763\text{ \AA}; 1,763\text{ \AA}; 1,763\text{ \AA}$$

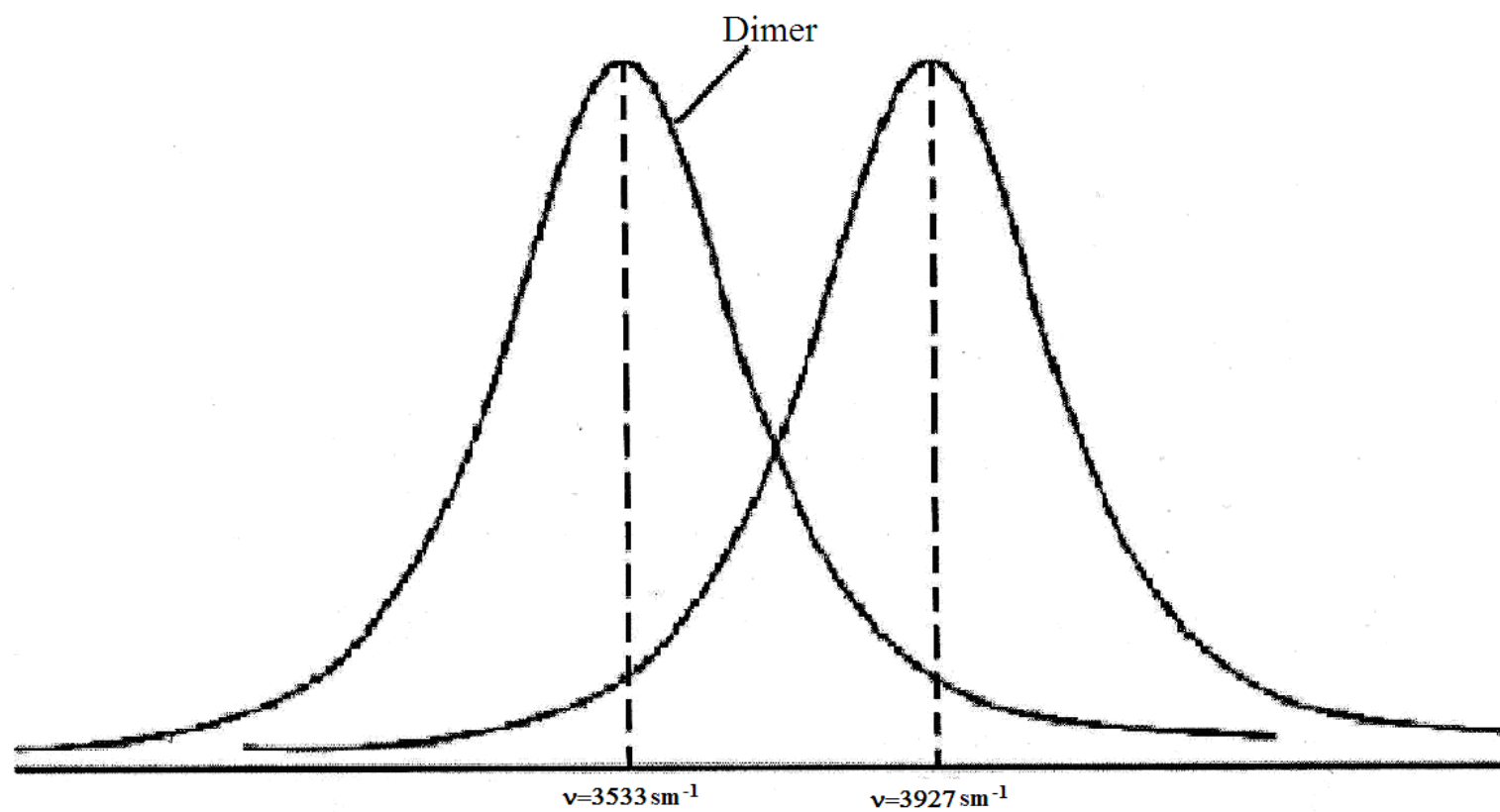
Xloroform monomeri atomlarining zaryadlari:

$$C^1 = -0,239; H^5 = +0,210; CI^2 = +0,010; CI^3 = +0,010; CI^4 = +0,010$$

xloroform dimeri atomlari zaryadlarining qiymati:

$$C^1 = +0,020; \tilde{N}l^2 = -0,035; CI^3 = -0,036; \tilde{N}l^4 = -0,043, H^5 = +0,88$$

elektron zaryadi birligida ko‘rinib turibdiki, atomlar zaryadi o‘zgargan, molekuladagi elektron qiymatida taqsimlanishi ro‘y beradi.



2.7-rasm. Pirollaning ν_M -monomer va ν_D -dimer holatida $C-H$ tebranish

Hisoblashlar ko'rsatadiki, pirrolaning $N-H$ gruppasi vodorod bog'lanishda to'g'ridan to'g'ri ishtirok etmaydi, lekin dimer hosil bo'lishda $N-H$ tebranish chastotasi (monomerda 3533 sm^{-1}) past chastota tomon 3927 sm^{-1} siljiydi.

Hamma hisoblashlar izoliyatsiyalangan monomer molekula va dimer agregatlar uchun suyuq holatning alohida xususiyatlarini hisobga olmagan holda o'tkazildi (monomer va dimerlarning muhit bilan o'zaro ta'siri, molekulalarning issiqlik harakati). Shuning uchun eksperiment bilan hisoblash natijalari mos kelmasligi mumkin. Lekin molekulalarning kattaliklarining o'zgarish tendensiyasi agregatsiyalanishda saqlanadi [29-30].

Shunday qilib, hisoblash va eksperimentlarning son qiymatlari to'g'ri kelmasada, kattaliklarning o'zgarish yo'nalishlari (polosalarning aralashish, energiya hosil bo'lishi, bog'larning uzunligi va boshqalar) to'g'ri hisoblanadi [31-33]. Kvanto - kimyoviy hisoblash natijalarida atomlar orasidagi bog' uzunligi, zaryadlar taqsimoti, tebranish chastotasi, qutbsizlanish koeffitsiyenti H - bog' uzunligi va vodorod bog' energiyasi aniqlandi.

Xulosa

1. Mavzu yuzasidan ilmiy adabiyotlar tahlili o'tkazildi va pirrolaning kombinatsion sochilish spektri, agregatsiyalari to'g'risida ma'lumotlar kam ekanligi ma'lum bo'ldi.

2. O'ta nozik optik rostlash talab etiladigan avtomatlashtirilgan spektrometr DFS-52 da $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ to'lqin uzunlikli argon lazeridan foydalanib ekperimental tadqiqotlar o'tkazilib, pirrolaning molekulalararo o'zaro ta'siri uchun neytral erituvchilardagi aralashmalarining kombinatsion sochilish spektri o'rganildi.

3. Kvanto-kimyoviy hisoblashlar izolyatsiyalangan monomer pirrola, xloroform va pirrola + xloroform dimer agregatlari uchun o'tkazildi.

4. Pirrola halqasida joylashgan π - elektronlarning aktivligi pirrolaning o'zida dimer agregatsiyani hosil qilishi pirrol + xloroform dimerini hisoblash natijasida aniqlandi. Bu vaqtda xloroformning vodorod atomi taxminan pirrola halqasi o'rtasida oriyentatsiyalanadi.

5. Dimerda zaryad taqsimoti ham o'zgargani ma'lum bo'ldi. Hisoblashlardan ma'lum bo'ldiki, pirrolaning $C-H$ gruppasi vodorod bog'lanishda to'g'ridan to'g'ri ishtirok etmaydi. $C-H$ tebranish chastotasi (monomer $\nu = 3533 \text{ sm}^{-1}$) past chastota tarafga siljiydi (dimer $\nu = 3927 \text{ sm}^{-1}$)

6. Xloroform + pirrola dimeri hosil bo'lishida H -bog'lanish energiyasi 2,5 kkal/mol ekanligi aniqlandi.

Tajriba natijalaridan foydalanib H -bog'lanishda molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini tushuntirishda va pirrola, xloroform ishlatiladigan ishlab chiqarish sanoatlariga amaliy maslahatlar berish mumkin. Talabalar BMI ni magistrlar dissertatsiyalarini yozishda, maxsus kurslarni o'qitishda, suyuqliklar strukturasi to'liq tushunishda foydali bo'lishi mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati

1. Каримов И.А. Жаҳон молиявий-иқтисодий инқирози Ўзбекистон шароитида уни бартараф этишнинг йўллари ва чоралари. Т.: Ўзбекистон. 2009.
2. Каримов И.А. Мамлакатимизда демократик ислохотларни янада чуқурлаштириш ва фуқоролик жамиятини ривожлантириш концепцияси. 2010 йил 12 ноябрь.
3. И.А.Каримов. Ўзбекистон мустақилликка эришиш оstonасида. Т.: 2011.
4. И.А.Каримов. Инсон манфаати, ҳуқуқи ва эркинликларини таъминлаш, ҳаётимизнинг янада эркин ва обод бўлишига эришиш – бизнинг бош мақсадимиздир. Ўзбекстон Республикаси конституциясининг 20 йиллигига бағишланган тантанали маросимдаги маърузаси. Т.: 2012.
5. И.А. Фабелинский. Молекулярное рассеяние света. М.: Наука.1965.
6. Ҳабибуллаев П.К., Булавин А.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х., Лизенгевич А.И., Отажонов Ш.О., Жумабоев А.Ж. Динамика молекул в жидкостях. Т.: 2009.
7. М.Ф. Вукс. Рассеяние света в газах, жидкостях и растворах. Л.: 1977.
8. Сущинский М.М. Спектры КР молекул и кристаллов. М.: Наука. 1969.
9. Брандмюллер И., Мозер Г. Введение в спектроскопию КРС. М.: Мир.1964.
10. Raman G.K., Krishnan R.S. Molekulyar spektra in extreme infrared Rotation of molecules induced by light.- Nature 1928, v. 122, P.278.
11. Landau L.D., Plachek G.P. Structure der unverschobenen streulinie.// Sow Phys, 1934. 5. P.172.
12. Гросс Е. Ф.Изв. АНРФ. Сер. Физ.- М., 1941, Т.5.С.19.
13. Leontovich M.A. Relaxation in liquids and scattering of light.// J. Phys. USSR, -М., 1941, 4.№ 6.P.499.

14. Вукс. М.Ф., Атаходжаев А.К., Тухватуллин Ф.Х. Крыле линии релеевского рассеяния света в жидкости и релаксационные явления. В.кн. Современные проблемы физической химии. М.: 1970. Т.5.
15. М.А.Еляшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия.М.: Наука.1962.
16. Дж. Пементоль Д. Мак Келлон. Водородная связь. Л.: 1964.
17. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М. ИЛ 1979 г.
18. F.N.Turhvatullin, A. Jumaboev, H. Hushvaqtoev, A.Absanov. G.Sharipov Journal of Atomic, Molekular and optikal Phesics (in prees).
- 19.Qo‘yliyev B.T. Optika. T.: Fan va taraqqiyot. 2014.
- 20.Варгафтик И.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука. 1972.
21. Бурштейн А.И, Темкин С.И; Спектроскопия молекулярного вращения в газах и жидкостях. Н.: Новосибирск . 1982 .
- 22.Тухватуллин Ф.Х., Жумабаев А. и др. Протоноакцепторные и пртонодонорные свойства молекул пиридина и спектры комбинационного рассеяния // ДАН РУз. Т.: 2008. -№4, -С. 36-39.
23. Тухватуллин Ф.Х., Жумабаев А. и др. Межмолекулярная водородная связь хинолина в растворах//IV Республика илмий-назарий конференцияси тезислари. – Т.: 2008. –С. 85-87.
24. Тухватуллин Ф.Х., Ж.Н.Хужамбердиева и др. Межмолекулярное взаимодействие в пирроле и его растворах// Фан, тараққийёт ва ёшлар. Илмий-амалий конференция. Қарши-2013. б. 20-26
25. Қўйлиев.Б.Т., Нурматова. Д., Останакулов У. ва бошқалар. Суюқликларда Н-боғланишни Раман эффекти орқали ўрганиш//Фан, тараққийёт ва ёшлар. Илмий-амалий конференция. Қарши-2012. б. 100-105.
26. Куйлиев.Б.Т., Хужамбердиева Ж.Н., Туропова Д., Мавлонова Х. и др. Влияние на формирование Q-полосы колебательно-вращательной взаимодействия дейтрометана в газовых смесях//Фан, тараққийёт ва ёшлар. Илмий-амалий конференция. Қарши-2013. Б. 40-45

27. Куйлиев.Б.Т., Бойбуриев О., Мейлиев Л. и др. Спектры комбинационного и релеевского рассеяния морфолина и его водных растворов // Нанотехнология ва қайта тикланадиган энергия манбалари: муоммолар ва ечимлар. Республика илмий-амалий анжуман материаллари. Қарши-2012 й. 27-28 апрель. Б.204-205

- 28.Куйлиев.Б.Т., Хужамбердиева Ж.Н., Рузиев Р.Т.. Спектры спонтанного комбинационного рассеяния // ҚарДУ хабарлари. №1. 2011.

29. Қўйлиев.Б.Т., Одилова Н.Ж., Мустафоева Н.М. ва бошқалар. Метил спирти ва унинг эритмаларда комбинацион сочилиш спектрини ўрганиш// Фан, тараққиёт ва ёшлар. Илмий-амалий конференция. Қарши-2013. Б. 46-49.

30. Куйлиев.Б.Т., Хужамбердиева Ж.Н., Туропова Д., Мавлонова Х., Эшнорова Д. Спектры комбинационного рассеяние дейтрометана в газовых смесях//IV международная конференция по актуальным проблемам молекулярной спектроскопии конденсированных сред. Посвящается памяти акад.А.К.Атаходжаева 29-31 мая, Самарканд – 2013.

31. Қўйлиев.Б.Т., Хужамбердиева Ж. Н., Пирова Т.Қ, Останакулов У., Мавлонова Х. Ж, Туропова Д. У.. Возможность когерентных волн// ҚарДУ хабарлари. № 3. 2012. Б. 6-9

32. Qo`yliiev B.T., Orlova N.D., Pozdnyakova L.A., Raman spektra of deuteromethane (CD₄) in mixtures with Ar and Kr. XX International School-Seminar "Spectroscopy of molecules and crystals", Beregove, Crimea, Ukraine, 20.09-27.09.2011. P. 52-53.

33.Замонавий физика ва астрофизиканинг долзарб муаммолари //

III Республика илмий-амалий анжумани материаллари. Қарши. 2015 й.

34. Foydalanilgan internet saytlari

[http // www.iop.Kiev.ua/-nbp2011](http://www.iop.Kiev.ua/-nbp2011)

[http // WWW.XIXISSSM.Kiev](http://WWW.XIXISSSM.Kiev)

[http // www. Bankreferatov.ru.kasu.uz.](http://www.Bankreferatov.ru.kasu.uz)

[http // WWW.Ziyonet.uz.](http://WWW.Ziyonet.uz)

[http // WWW.frast.uz.](http://WWW.frast.uz)

[http // www.iop Kiev –nbp issmc i-site](http://www.iop Kiev –nbp issmc i-site)

<http://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=Уксыс->