

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

QARSHI DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA-MATEMATIKA FAKULTETI
FIZIKA KAFEDRASI

MIXLIYEVA MAFTUNA TO‘LQIN QIZINING

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

**α -PIKOLIN VA UNING METIL SPIRTI ERITMALARINI
TEBRANISH SPEKTRI HAMDA KVANTO-KIMYOVIY
HISOBLASHLAR ORQALI O‘RGANISH**

Mavzusida yozgan

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Ilmiy rahbar: prof.. A.Jumaboyev

“Himoyaga tavsiya etilsin”

Fizika – matematika fakulteti

dekani: _____ prof. A.Tashatov

“ _____ ” 2015 yil

Qarshi – 2015

MUNDARIJA

Kirish	3
I BOB. Eritmalarda yorug'likning sochilishi	6
1.1. Kimyoviy bog'lanish, vodorod bog'lanish va uning6 tabiat.....	
1.2. Yorug'likning kombinatsion sochilishi va uning kvant14 nazariyasi	
1.3. Molekulalarning tebranma spektrlari	20
II BOB. Tajriba qurilmasi va metodikasi	29
2.1. DFS-52 spektrometrining tuzilishi va ishlash prinspi.....	29
2.2. Tadqiqot obyektni tajribaga tayyorlash.....	34
2.3. Tajriba natijalari va ularning tahlili	36
Xulosa	43
Foydalanilgan adabiyotlar	44

KIRISH

Molekulalararo o'zaro ta'sirlar ichida molekulalararo vodorod bog'lanish muhim o'rin egallaydi. Molekulalararo vodorod bog'lanish tabiati va uning spektroskopik namoyon bo'lishi esa hali to'lig'icha o'rganilmagan. Shuning uchun suyuqliklarning tuzilishi, anomal xossalari, molekulalararo vodorod bog'lanishi va molekulyar manzarasi bo'yicha hozirgi kungacha ilmiy-tadqiqot ishlari olib borilmoqda. Shuning uchun suyuqliklarni o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir. Azot atomli molekulalarning tabiatini va ularda sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchlari bo'yicha juda ko'plab ilmiy tadqiqot ishlari olib borilgan bo'lib, ularning kombinatsion sochilish spektrlaridagi spektral chiziqlari murakkab ko'rinishga ega ekanligi bo'yicha xulosalar chiqarilgan [1]. Ushbu tadqiqot ishida azotli molekulalardan yana biri α -pikolin va uning eritmalarida sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchini o'rganish uchun tajriba va kvanto ximik hisoblashlar o'tkazdik.

Bitiruv malakaviy ishining dolzarbligi: Ushbu keltirilgan fikrlarga asoslangan holda ushbu malakaviy bitiruv ishida molekula xossalari va ular orasidagi o'zaro ta'sirlarni o'rganish uchun α -pikolinning molekulasini tanlab oldik va α -pikolin xususiyatlarini kombinatsion sochilish spektrlari hamda kvantokimyoviy hisoblashlarda o'rgandik. α -, β -, γ -pikolinlar eritmalarining kombinatsion sochilish (KS) spektrlaridagi molekulalararo o'zaro ta'sirining yuzaga chiqishi hususiyatlari o'rganilgan. Protonodonorli erituvchilar (suv, metil va etil spirti)da pikolinlarning yuqorida sanab o'tilgan erituvchi bilan molekulalararo vodorod bog'lanishining spektral namoyon bo'lishi o'rganilgan bo'lib, bunda pikolin molekulasidagi azot atomlari ishtirokidagi atomlarning ba'zi bir tebranish polosalari ikkita polosaga ajratiladi: monomerlar polosasiga va agregatlar polosasiga, bunda agregatlar polosasining chastotasi monomerlar chastotasidan katta bo'ladi. Agregatsiyalanishlarning bunday spektral namoyon bo'lishi ko'pgina azotli molekulalar uchun xarakterlidir [2].

Tadqiqot predmeti va obykti: Bitiruv malakaviy ishining taqqiqot obykti qilib α -pikolin ($C_5H_4NCH_3$) va metil spirit tanlangan. α -pikolin va uning eritmalarini tebranma spektrlarini kombinatsion sochilish spektri orqali o'rganish predmeti hisoblanadi.

Bitiruv malakaviy ishining maqsad va vazifalari: Molekulalarning tebranma spektrlarini o'rganish orqali ko'plab ma'lumotlar olish mumkin. Ushbu ishdan asosiy maqsad yorug'likning muhitlardan kombinatsion sochilish spektri orqali α -pikolin va uning metil spertidagi eritmalarini strukturaviy tuzilishini tebranish spektrlarini tahlil qilish orqali o'rganishdan iborat. Tajriba qurilmasini ishlash usuli yustrofka, fokusirofva qilishni va tajriba natijalarini to'la tushunish uchun kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazish kabi vazifalarni belgiladik.

Mavzuni o'rganilish darajasining qiyosiy tahlili: Mavzu bo'yicha tadqiqotlar Sankt-Peterburg (Rossiya) universitetining Molekulyar spektroskopiya, O'zbekistom Milliy universitetining Optika va lazer fizikasi, Samarqand Davlat universitetining Optika va spektroskopiya, Qarshi Davlat universitetining Fizika kafedralarida va dunyoning ko'pgina ilmiy markazlarida olib boriladi. Ushbu bitiruv malakaviy ishi Samarqand Davlat Optika va spektroskopiya kafedراسi qoshidagi akademik A.K.Otaxo'jayev nomidagi muammolar laboratoriyasi va kafedra o'rtasida hamkorlik shartnomasi doirasida bajarilgan. Bunday tadqiqotlar o'z qiyinchiliklariga ega. Masalan qurilmalar bilan bog'luq bo'lgan optik sistemalardagi kamchiliklar. Nazariy tushuntirishlarni eksperiment natijalari bilan mos kelmasligi. Shuning uchun ham bunday nazariy va eksperimental tadqiqotlar yanada zarur hisoblanadi.

Bitiruv malakaviy ishining ilmiy va amaliy ahamiyati: Hozirgi kunda fizika va kimyoning asosiy masalalaridan biri moddaning atom va molekulalarining tuzilishini o'rganishdan iborat. Suyuqliklar strukturasi eksperimental va nazariy hisoblashlar orqali o'rganish masalaga oydinlik kiritishi mumkin, qolaversa shu modda ishlatiladigan ishlab chiqarish korxonalariga ilmiy maslahatlar berish munker. Olingan natijalarga asoslanib monomer, dimer agregatsiyalar haqida

tasavvur hosil qilish mumkin. Tadqiqot natijalaridan maxsus kurslarni o'qitishda, talabalar bitiruv malakaviy ishlari, magistrlik dissertatsiyalarini yozishda, tezislar, maqolalar tayyorlashda foydalanish mumkin.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi: Tadqiqot qurilmasi va metodikasi $\lambda=4880\text{\AA}$ to'lqin uzunlikli argon lazerining ishlash usullari o'rganildi. α -pekolin boshqa protonodonorlik molekulalar bilan molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilishi aniqlandi. α -pekolin va metil spirit orasida vodorod bog'lanish mavjudligi uchun spektral chiziq kontirida o'zgarish nomoyon bo'lishi aniqlandi. α -pekolin va metil spirit ochiq strukturasi dimer hosil qilishi aniqlandi. Kvanto-kimyoviy hisoblashlarda vodorod bog'lanish uzunligi zaryadlar taqsimoti bog' uzunliklari aniqlandi va tajriba natijalari bilan solishtirib xulosalandi.

Bitiruv malakaviy ishini tuzilishi: Kirish, ikki bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar, 16-ta rasm, 3-ta jadvalni o'z ichiga olgan 46 sahifada bayon etilgan.

I BOB. Eritmalarda yorug'likning sochilishi

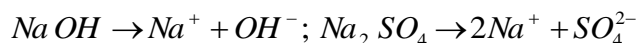
1.1. Kimyoviy bog'lanish, vodorod bog'lanish va uning tabiati

Atomlar bir-biri bilan birikkanida oddiy va murakkab moddalar hosil bo'ladi. Shu hodisalarda kimyoviy bog'lanishning turli ko'rinishlari - *ion, kovalent* (qutbli, qutbsiz) *metall* hamda *vodorod* bog'lanishlar bunyodga keladi. Atomlar o'zaro birikkanida ular orasida kimyoviy bog'lanishning qaysi ko'rinishi - ion bog'lanishmi yoki kovalent bog'lanish hosil bo'lishini aniqlaydigan xossalari - *elementlarning elektrmanfiyligi*, ya'ni o'ziga elektronlarni biriktira olish xususiyatlari ham hisoblanishini esga tushiraylik. Bunda shu narsaga e'tibor berish kerakki, elementlar atomlarining elektromanfiyliklari bir elementdan boshqa elementga o'tilganida asta-sekin o'zgaradi. Davriy sistema davrlarida elektromanfiylikning son qiymatlari chapdan o'ngga o'tganida kattalashadi, gruppalarda yuqoridan pastga tomon kamayadi. Kimyoviy bog'lanish turi birikayotgan elementlar atomlarining elektromanfiyliklari qiymatlari orasidagi ayirmaga bogliq bo'lganligi uchun kimyoviy bog'lanish turlari orasiga keskin chegara qo'yib bo'lmaydi. Kimyoviy bog'lanish o'zining xarakteri jihatidan chegara holatlarda qaysi turga yaqinligiga qarab ayni bog'lanishni ionli yoki kovalent qutbli bog'lanishlarga kiritiladi [3].

Ion bog'lanish. Elektrmanfiyliklari jihatidan bir- biridan keskin farq qiluvchi atomlar o'zaro ta'sirlashganida ion bog'lanish kelib chiqadi. Masalan, tipik metallar litiy Li, natriy Na, kaliy K, kalsiy Ca, stronsiy Sr, bariy Ba lar tipik metallmaslar, asosan galogenlar bilan ion bog'lanish hosil qiladi.

Shuni ham nazarda tutish kerakki, ishqoriy metallar hatto kislorod va oltingugurt kabi elektrmanfiy elementlar bilan o'zaro ta'sirlashganida ham to'la ion bog'lanish hosil bo'lmaydi. Masalan, Li_2O , Na_2S kabi birikmalarda ham to'liq ion bog'lanish uchramaydi, Li bilan kislorod, Na bilan S orasida faqat kuchli qutbli kovalent bog'lanish mavjud.

Ion bog‘lanish ishqoriy metallarning galogenidlaridan tashqari, ishqor va tuzlar kabi birikmalarda ham mavjud bo‘la oladi. Masalan, natriy gidroksid NaOH va natriy sulfat Na₂SO₄ da ion bog‘lanish faqat natriy va kislorod atomlari orasidagina mavjud. Boshqa bog‘lanishlar esa kovalent — qutbli bog‘lanishlardan iborat. Suyultirilgan eritmalarda ishqor va tuzlar quyidagicha ionlarga dissotsilanadi:

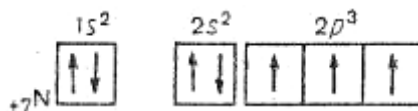


Ionlar orasida juda kuchli elektrostatik o‘zaro tortilish kuchlar mavjud. Shu sababdan ionli birikmalar deyarli yuqori haroratga ega bo‘lgan sharoitdagina suyuqlana oladi.

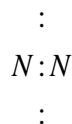
Kovalent qutbsiz bog‘lanish. Elektrmanfiyliklari bir xil bo‘lgan atomlar o‘zaro birikkanida kovalent qutbsiz molekularlar hosil bo‘ladi. Bunday bog‘lanish bir xil atomlardan iborat H₂, F₂, Cl₂, O₂, N₂ kabi gazsimon moddalarning molekularlarida mavjud ekanligini eslaylik. Bu moddalarda kimyoviy bog‘lanishlar umumlashgan elektron juftlar vositasida, ya’ni muvofiq elektron bulutlarning o‘zaro qoplanishi tufayli atomlar bir-biriga yaqinlashganida yadro bilan elektron orasidagi o‘zaro ta’sir natijasida amalga oshadi [5-12].

Kovalent qutbsiz moddalarning elektron formulalarini qanday tartibda tuzish kerakligini (azot molekulasida N₂ misolida) qarab chiqamiz.

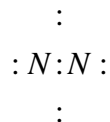
1. Elektronlarning azot atomidagi energetik pog‘ona va pog‘onachalarda joylanish sxemasini yozamiz:



2. Azot atomida uchta tok elektron borligini anqlab olamiz, shunga ko‘ra N₂ molekulasining tarkibida ikkita azot atomi orasida uchta bog‘lovchi elektron juft hosil bo‘lishi kerak:



3. Har qaysi azot atomining tashqi elektron pog‘onasida qoladigan ajralmas bir juft elektronni alohida tarzda quyidagicha tasvirlaymiz:



Moddalarniig elektron formulalarini tuzar ekanmiz har qaysi umumlashgan elektron juftni nuqtalar bilan ko‘rsatib, muvofiq elektron bulutlarning bir-birini qoplashi natijasida kelib chiqqan yuqoriroq zichlikdagi elektron bulut deb tasavvur qilmog‘imiz kerak. Azot molekulasida *p*- elektron bulutlar bitta δ (sigma) va ikkita π (pi)-bog‘lanishlar hosil qiladi. Ayni holda pishiq uchlamchi borlanish hosil bo‘ladi,

Kovalent qutbsiz bog‘lanish natijasida hosil bo‘lgan ayrim neytral molekulalar orasida o‘zaro tortishuv kuchlar ionlar orasidagi tortishuv kuchlardan farq qilib, zaif bo‘ladi, Shunga ko‘ra, kovalent qutbsiz bog‘lanishga ega bo‘lgan modsalar past- haroratda suyuqlanadi.

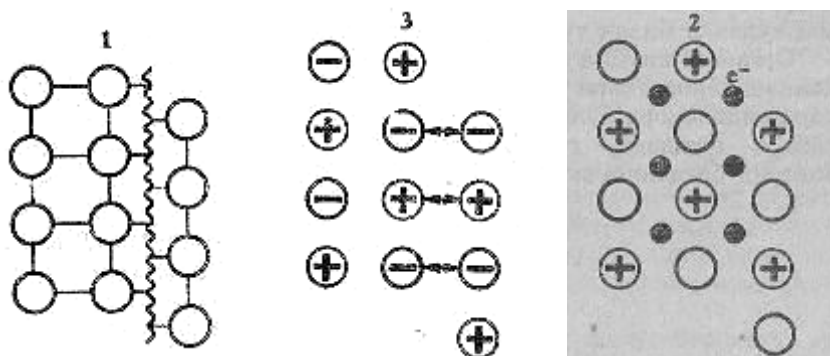
Kovalent qutbli bog‘lanish. Elektrmanfiyliklari jihatidan bir-biridan u qadar keskin farq qilmaydigan elementlarning atomlari o‘zaro ta’sirlashganida umumiy elektron juft elektrmanfiyligi kattaroq bo‘lgan atom gomon siljiydi va kovalent qutbli bog‘lanish hosil bo‘ladi, Qutbli molekulalar orasida ham elektrostatik kuchlar mavjud bo‘lganligi uchun bu birikmalarning suyuqlanish va qaynash haroratlari kovalent kutbsiz bog‘lanishli moddalarnikiga qaraganda biroz yuqori bo‘ladi.

Donor-akseptor mexanizm bo‘yicha, masalan, gidroksoniy va ammoniy ionlari hosil bo‘lganida amalga oshadigan bog‘lanish ham kovalent qutbli bog‘lanishlar jumlasiga kiradi. Kovalent bog‘lanishning bu turi anorganik va organik birikmalarda eng ko‘i uchraydi.

Metall bog‘lanish. Metallarning kristall payukarasida nisbatan erkin elektronlarning metall ianlari bilan o‘zaro ta’sirlashuvi natijasida hosil bo‘ladigan bog‘lanish metall bog‘lanish deb ataladi.

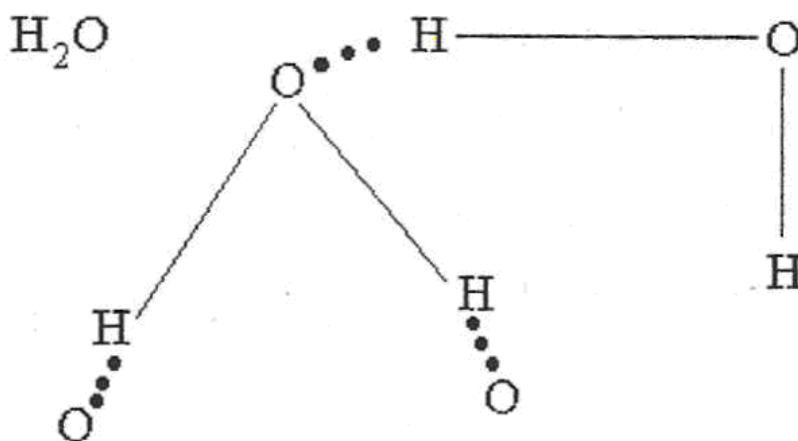
Metall bog‘lanishning hosil bo‘lish mohiyati quyidag‘idan iborat. Metall atomlari tashqi elektronlarini asosi bilan yo‘qota oladi; shu jarayon natijasida bu atomlarning ba’zilari musbat zaryadli ionlarga aylanadi. Atomlardan ajralib chiqqan elektronlar nisbatan erkin ravishda musbat zaryadli metall ionlari orasida harakat qiladi. Ionlar bilan elektronlar orasida metall borlanish bunyodga keladi, ya’ni elektronlar musbat zaryadli ionlarni metallning kristall panjarasiga go‘yo mahkam yopishtiradi, sementlaydi (1.1-rasm). Metallarning o‘zlariga xos fizikaviy xossalari metallarning ana shunday tuzilishidan kelib chiqadi.

Metallarning elektr va issiqlik o‘tkazishi metall panjarasida erkin elektronlar borligidan kelib chiqsadi. Metallarning cho‘ziluvchanligi va plastikligi metallning ion atomlari metall panjarada bir-biri bilan bevosita bog‘lanmaganligi tufayli, ularning ayrim qavatlari bir-birlariga nisbatan erkin harakat qilishidan kelib chiqadi.



1.1-rasm. Kristall panjara tuzilishining tegishli moddalarning mexanik mustahkamlash bilan bog‘lanishi: 1-atom panjara, 2-ion panjara, 3-metall panjara

Vodorod bog‘lanish o‘ziga xos bog‘lanish bo‘lib, bunday bog‘lanishlar quyidagi hollarda F,O, H,Cl,Br....lar bilan bog‘langan biron molekula tarkibidagi H atomi boshqa molekula tarkibidagi shunday atomlar bilan bog‘lanish hosil qilsa, unga vodorod bog‘lanish deymiz (1.2-rasm).



1.2-rasm. Vodorod bog‘lanish ko‘rinishi

Vodorod bog‘lanish jarayonida go‘yoki vodorod atomining 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 hakoza 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 N azot atomi spirtidagi $\text{O-H}\dots\text{N}$ 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 sharoitning ta’siri (R, T).

Umuman molekulalar spektrlar mikro va makro parametrlarning o‘zgarishiga juda ham sezgir. Ayniqsa molekulalarning issiqlik harakatiga ikkita mikroparametr T va R ning ta’siri har doim sezilarli bo‘ladi. Bosimning oshishi bilan suyuqliklarning yopishqoqligi oshib boradi. Bular hammasi Releycha va kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektrlarida YAMR larida yaqqol namoyon bo‘ladi[13-14].

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 o‘zaro 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 tug‘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. Har qanday kimyoviy element o‘zining tashqi energetik sathida elektronlar sonini tugallangan holatga yetkazishga intilishini kimyo fanidan yaxshi bilamiz. Inert gazlarning tashqi energetik sathida esa elektronlar soni tugallangan bo‘ladi.

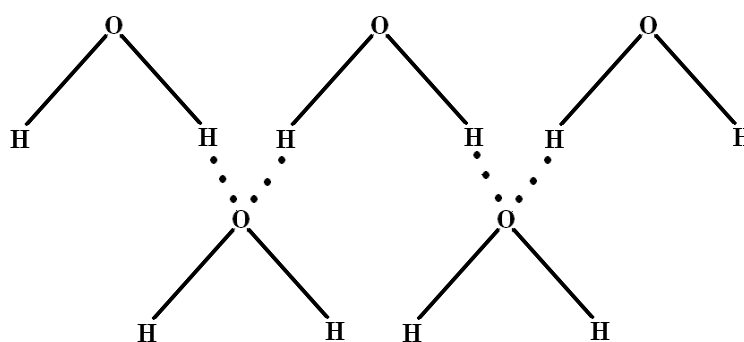
Har bir element o‘zining tashqi energetik sathidagi elektronlarning yadroga bog‘lanish energiyasi bilan farqlanadi. H -bog‘lanish elektron manfiylik tushunchasi muhim o‘rin tutadi. Masalan fluor F atomining tashqi elektron sathida

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 elektron manfiylik deyiladi.

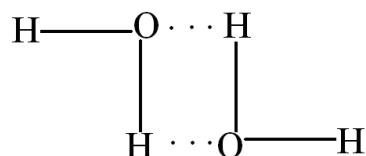
Elektron manfiyligi eng yuqori bo‘lgan element ftordir. Seziyniki eng kichikdir. *H*-bog‘lanish kimyoviy bog‘lanish turiga kirib ichki molekulyar va molekulalararo bog‘lanish bo‘lishi mumkin.

XIX asrning oxirlarida M.A.Ilinskiy kislorod yoki azot bilan birikkan vodorod boshqa atom bilan ham birika olishini, ya‘ni vodorodda asosiy valentlikdan tashqari qo‘shimcha valentlik ham borligini aytib, bu hodisani nazariy jihatdan 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 izohlab 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 $5 \div 7$ 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 qo‘shimcha bog‘langan:



Buning natijasida suv molekulari 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 yozilsa bo‘ladi.



Suyuqliklarda ko‘p tarqalgan assotsasiya birikib, yirikroq zarracha hosil qilish hodisasining sababi N-bog‘lanishdir deyish mumkin. *H*-bog‘lanishning kelib chiqishi vodorod atomining tabiatiga bog‘liqdir. *H*-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. Shu sababli vodorod ionlari boshqa atomlarning elektron qavatiga yaqinlashadi va ichiga kira oladi. *H*-bog‘lanish yuqorida aytganimizdek uncha mustahkam emas. Kimyoviy bog‘lanish mustahkamligi shu bog‘lanishni tamomila uzish uchun kerak bo‘ladigan energiya bilan o‘lchanadi. Bu energiya bog‘lanish energiyasi nomi bilan yuritiladi [13].

1.2. Yorug'likning kombinatsion sochilishi 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 bunday sochilish Reley sochilishi deb yuritiladi. Bu sochilish kogerent tarzda yuz beradi. Shu sababli ham Reley sochilishi - yorug'likning kogerent sochilishidir. Biroq sinchiklab o'tkazilgan tekshirishlarning ko'rsatishicha, sochilgan yorug'lik spektrida tushayotgan yorug'likni xarakterlaydigan chiziqlardan tushsa: qo'shimcha chiziqlar (yo'ldoshlar) borligi, bular tushayotgan yorug'likning har bir chizig'i yonida turishi ma'lum bo'ldi.

Yo'ldoshlar tushayotgar 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 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:

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

- Yo'ldoshlar uyg'otuvchi chiziqdan ikki tomonda simmetrik yotuvchi chiziqlarning ikki sistemasidan iborat, (1.3 -rasm) ya'ni

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

Bu yerda chapda uyg'otuvchi chastotalardan uzunroq to'lqinli 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.

- Temperatura ko'tarilganda «binafsha» yo'ldoshlarning intensivligi tez ortadi.

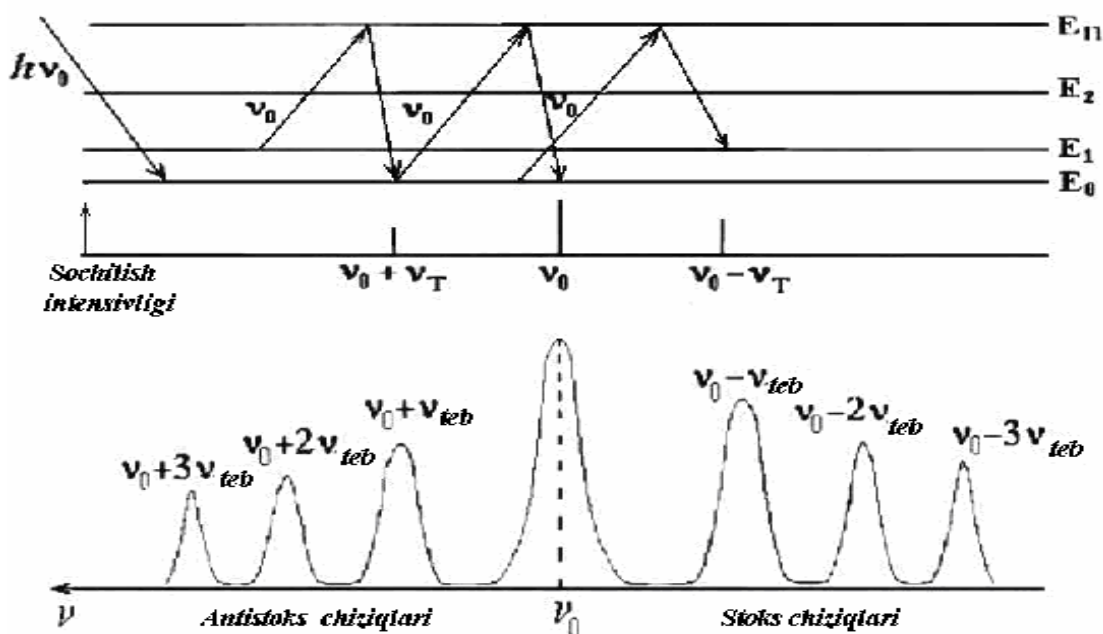
Kombinatsion sochilishni birinchi bo'lib G.S.Landsberg va L.I.Mandelshtamlar hamda hind olimlari Raman va Krishnanlar kashf etishgan (1928 yil). Hind olimlari Nobel mukofotiga sazovor bo'lishgan. Chet el adabiyotlarida Raman effekti deb ham yuritiladi. Bu sochilish odatda kombinatsion sochilish deyiladi.

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

To'qnashish elastik bo'lmagan holda fotonning energiyasi $h\nu_i$ tebranma kvant miqdorida ortadi yoki kamayadi. Agar yorug'lik tebranish holatida bo'lmagan molekula bilan o'zaro ta'sir qilishsa, yorug'lik molekulaga

energiyasining tegishli qismini berib, $h\nu' = h\nu_0 - h\nu_i$ yoki $\nu' = \nu_0 - \nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda kichik chastotali nurga (qizil yo'ldosh, Stoks chizig'iga) aylanadi, bu yerda ν_0 uyg'otuvchi yorug'lik chastotasi, ν_i - molekula tebranishlarining chastotasi.

Agar yorug'lik tebranish holatida turgan molekulaga, ya'ni $h\nu_i$ - energiyaga ega bo'lgan molekulaga ta'sir qilsa, u holda yorug'lik molekuladan bu energiyani tortib olib, $h\nu' = h\nu_0 + h\nu_i$ yoki $\nu' = \nu_0 + \nu_i$ tenglamaga muvofiq ravishda katta chastotali nurga (binafsha yo'ldosh, antistoks chizig'iga) aylanadi. Buni 1.3-rasmdan osongina tushinish mumkin. Yuqorida aytilganlardan kelib chiqib kombinatsion sochilishga quydagicha ta'rif berish mumkin: Sochilgan yorug'likning chastotasi tushayotgan yorug'likning chastotasi ν_0 bilan molekular ichida bo'ladigan tebranishlar chastotasining ν_i kombinatsiyasidan tarkib topadi. Shuning uchun bu sochilish kombinatsion sochilish deb ataladi.



1.3-rasm. Uyg'otuvchi manbaning (a) va kombinatsion sochilish spektrining (b) sxematik ko'rinishi. (E_0, E_1, \dots energetik holatlar)

Tebranish holatida bo'lgan molekular soni uyg'otilmagan molekular sonidan ancha kam bo'ladi. Shuning uchun binafsha yo'ldoshning intensivligi qizil yo'ldosh intensivligidan beqiyos darajada kam bo'lishi kerak; tajribada ham xuddi

shunday bo‘ladi. Temperatura ko‘tarilgan sari uyg‘otilgan molekulalar 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:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - e^{-\frac{hv}{KT_2}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{hv}{KT_1}}\right)}. \quad (1.1)$$

Stokc chiziqlarining intensivligi temperaturaga teskari proporsional ekan. Antistoks chiziqlariniki esa temperaturaga to‘g‘ri proporsional bo‘ladi:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{e^{-\frac{hv}{KT_1}}}{e^{-\frac{hv}{KT_2}}}. \quad (1.2)$$

Stokc va antistoks chiziqlarining intensivliklari nisbati

$$\frac{I_{\infty}}{I_c} \approx \left(\frac{v_0 + v_{teb}}{v_0 - v_{teb}}\right)^4 \quad (1.3)$$

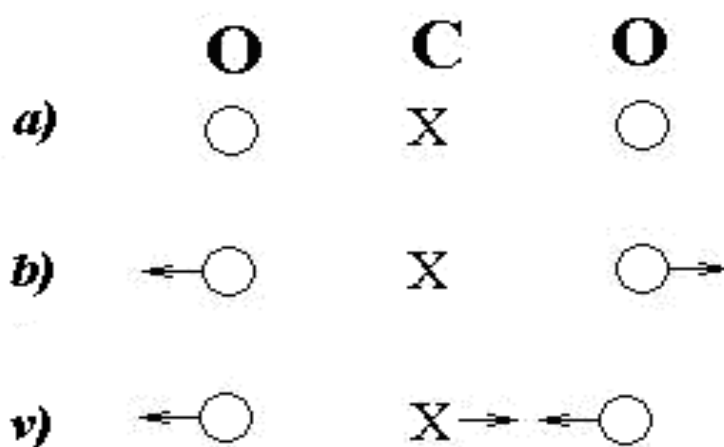
bundan ko‘rinadiki chastotaning to‘rtinchi darajasiga proporsional ekan.

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.

Ba‘zi tebranishlar infraqizil spektrida, aktiv bo‘lsa, boshqasi kombinatsion sochilish spektrida aktiv bo‘ladi [14].

Masalan: CO_2 molekulasida atomlar tebranganda (1.4-rasm, b) 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 (1.4-rasm).



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

Boshqacha tebranishda (1.4-rasm, *a*) 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, *b*) kombinatsion sochilish chizig'i paydo bo'ladi, bu chizikning chastotasini kombinatsion sochilish spektridan aniqlash mumkin; ikkinchi tur tebranishda (1.4-rasm, *v*) chastotani infraqizil yutilish polosasining vaziyatiga qarab topish mumkin.

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

Ko'p hollarda bu usul infraqizil yutilish metodi bilan birga qo'shib o'rganilib, molekulani to'liq tadqiq etish imkonini beradi. Kombinatsion sochilish spektrlari molekulalar uchun shunchalik xarakterlidirki, 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: uglevodo- rodlarning juda murakkab aralashmasi bo'lgan benzinlarning tarkibi kombinatsion sochilish metodi yordamida samarali ravishda analiz qilinadi.

Yuqorida 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 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 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 holida esa ossillyatorlar elektronlar harakatini tavsiflaydi. Bu o'xshashlikni nazarda tutib, yuqorida yuritilgan mulohazalarni klassik modulyatsion manzara nuqtai nazaridan ham soddalashtirilgan kvant sxema nuqtai nazaridan ham endi atomlarga nisbatan takrorlash mumkin.

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 sochish hodisasi 1963 yilda, atomlarning kombinatsion sochilish hodisasi 1967 yilda topildi.

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

Molekulalar strukturasi, ichki molekulyar va molekulalararo kuchlarni o'rganishda, murakkab aralashmalarni tahlil qilish va u yoki bu birikmalarni identifikatsiyalash (ajratish) da kombinatsion sochilish usuli muhim anjomdir [14,15].

1.3.Molekulalarning tebranma spektrlari

Aylanma harakatlarni moddaning gaz holatlarida batafsil o‘rganish mumkin. Bunday harakatni suyuqliqlarda va qattiq jismlarda toza holda o‘rganish qariyb mumkin emas. Tebranma harakatlarni esa moddaning har qanday agregat holatida o‘rganish mumkin.

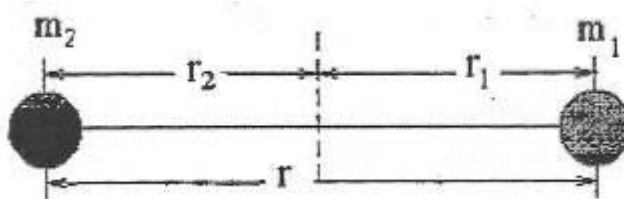
Tebranma harakatni o‘rganish paytida potensial energiyaning yadrolar orasidagi masofaga bog‘liqligini bilish yoki $U(r)$ funksiyaning grafigini bilish katta ahamiyatga ega. Tebranma harakat paytida yadrolarning potensial energiyasi deganda asosan elektronning to‘liq energiyasi (kinetik, potensial) katta rol o‘ynaydi. Molekulalarning tashkil topishining kvanto-mexanik xisoblashlari shuni ko‘rsatadiki $U(r)$ funksiya $r=r_e$ nuqtada minimal qiymatga ega, shu boisidan $U(r)$ ni $r=r_e=q$ deb olib qatorga yoyishimiz mumkin. $\Delta j = \pm 1$

$$U(r) = U(r_e) + \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_e} (r - r_e) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_e} (r - r_e)^2 + \dots \quad (1.4)$$

$r = r_e$ nuqtada $\frac{dU}{dr} = 0$ bo‘ladi. $\left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_e} = k$ deb belgilaymiz.

$$U(r - r_e) = k \frac{(r - r_e)^2}{2} = \frac{1}{2} k q^2 \quad (1.5)$$

Ikkinchidan ko‘rinadiki kichik tebranishlar paytida $U(r)$ ni parabola deb ya’ni ikki atomli molekulaning kichik tebranishlarini garmonik tebranma harakat deb qabul qilsa bo‘ladi. Umuman 2 atomli molekulaning tebranishlarini tekshirganda garmonik ossillyator modelidan foydalanish mumkin. Har qanday 2 atomli molekulani garmonik ossillyator deb qabul qilsa bo‘ladi (1.5-rasm).



1.5-rasm. Ikki atomli molekulalar

Rasmda keltirilgan zarrachalarni tortib turuvchi kuchlarni topish uchun 1.15-tenglamadan hosila olish kerak

$$F = \frac{dU(r-r_e)}{dr} = -k(r-r_e) \quad (1.6)$$

k -ga kvazielastiklik doimiyligi deyiladi.

Agar $r_1 + r_2 = r$ va hamda $m_1 r_1 + m_2 r_2$ desak u vaqtda har bir zarrachaning tebranishini harakterlaydigan kuchni quyidagi differensial ko‘rinishda yozish mumkin

$$m_1 \ddot{r}_1 = -k(r-r_e)$$

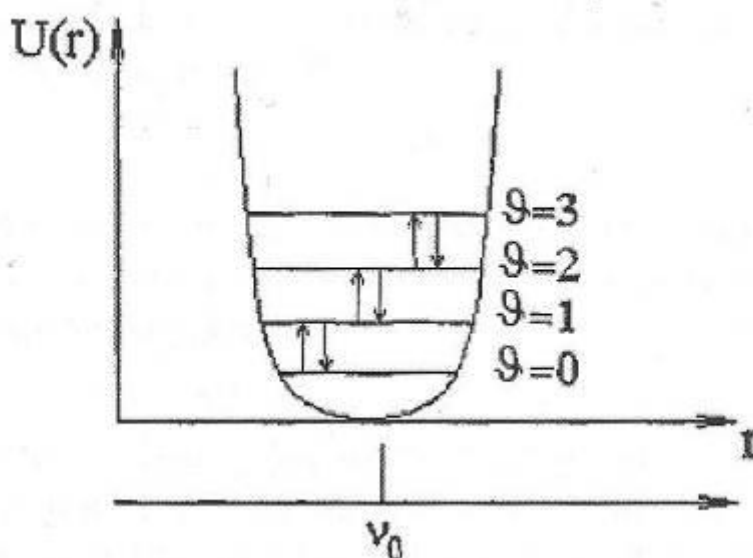
$$m_2 \ddot{r}_2 = -k(r-r_e)$$

Bularning hammasidan ko‘rinadiki, garmonik ossillyatorning chastotasi

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$$

bu formula garmonik ossillyator xususiy chastotasini aniqlaydi. Qachonki bu garmonik ossillyator potensial energiyasini (1.15) chi bilan ifodalasa, garmonik ossillyatorning energiyasi kvantlangan bo‘ladi. U quyidagicha aniqlanadi.

$$E_{teb} = \left(\mathcal{G} + \frac{1}{2} \right) h\nu_0 \quad (1.7)$$



1.6-rasm. Garmonik ossillyatorning energiyasi

\mathcal{J} -tebranma kvant soni. 0, 1, 2, 3 ... qiymat olishi mumkin.

(1.17)-chi ifodadan ko‘rinadiki, tebranma energetik holatlar teng masofada joylashadi.

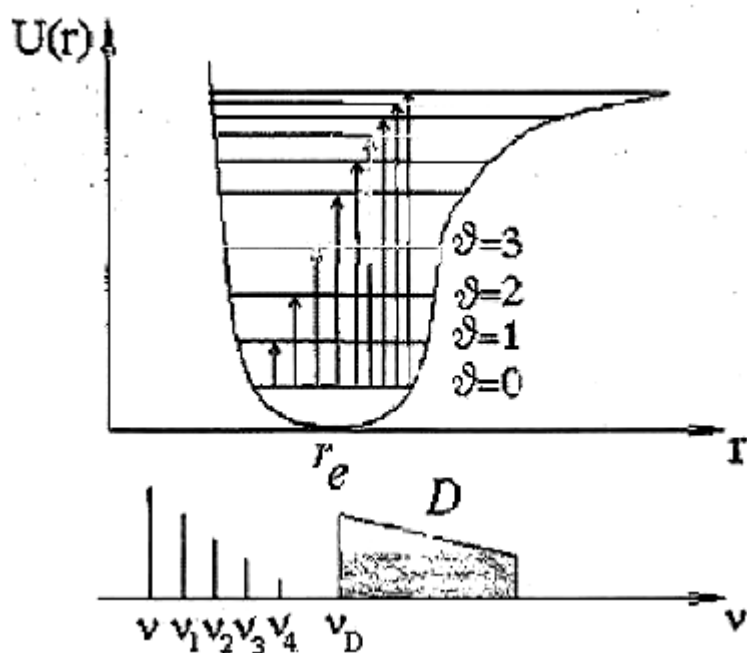
Grafikdagi har bir holat orasidagi masofa $h\nu_0$ ga teng. Real molekulaning tebranishlari garmonik ossillyatorning tebranishlaridan keskin farq qiladi [16].

Real molekulaning tebranishlari angarmonik tebranishlardir. Tebranma holatlar orasida o‘tishlar tanlash qoidasiga asosan $\Delta\mathcal{J} = \pm 1$ bo‘ladi; bundan ko‘rinadiki, garmonik ossillyatorning spektri bitta chiziqdan ν_0 dan iborat bo‘ladi.

Katta amplitudali tebranishlarda tebranishlarni garmonik ossillyator sifatida qarash mumkin emas, Angarmonik tebranishlarni ifodalash uchun bir nechta tenglamalar topilgan. Asosiysi Morze tenglamasidir

$$U(q) = D \left(1 - e^{-a(r-r_e)^2} \right) \quad (1.8)$$

a -potensial egriligini harakterlaydigan kattalik. Bu tenglamada $r \rightarrow \infty$ intilsa $U(q) = U(r-r_e) \rightarrow D$ intiladi. Ya’ni katta amplitudali tebranishlar paytida molekula dissotsiatsiyalanishi mumkin (1.7-rasm).



1.7-rasm. Molekula dissotsiatsiyalanish energiyasi

Angarmonik ossillyatorning spektri garmonik ossillyatorning spektriga qaraganda ancha murakkab bo‘ladi. Xususiyl holda Morze formulasini quyidagicha yozish mumkin:

$$U(r - r_e) = Da^2(r - r_e)^2. \quad (1.9)$$

(1.19)-chi formula 1.15-chi formula bilan mos keladi, ya’ni Morze tenglamasidan garmonik tebranma harakat tenglamasini hosil qilamiz.

Eksperimental tekshirishlar shuni ko‘rsatadiki kvazielastik kattalik k bilan D dissosiyatsiya energiyasi orasida bog‘lanish mavjud

$$k = 2Da^2$$

Quyidagi 1.1-jadvalda shu bog‘lanishni ifodalovchi ba’zi ma’lumotlar keltirilgan. α -doimiy son bo‘lib $U(r)$ funksiyaning ko‘rinishiga bog‘liq bo‘ladi. Garmonik ossillyator bo‘lsa $\alpha = 1$ bo‘ladi.

1.1-jadval

Molekula	D, kkal/mol	K:10 ⁻² , N/m
HF	145	8,65
NSl	102	4,47
NVr	87,5	3,78
HJ	71,5	2,89

$$v_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}} \quad \text{va} \quad k = 2Da^2$$

bularni solishtirib quyidagi ifodani yozishimiz mumkin.

$$a = 2\pi v_0 \sqrt{\frac{M}{2D}}$$

1.7-rasmdagi $\mathcal{G} = 0 \rightarrow \mathcal{G} = 1$ o‘tish paytidagi hosil bo‘lgan spektral chiziqqa asosiy chiziq deyiladi yoki fundamental o‘tishlar ham deyiladi. Chastotasi v_0 dan $\mathcal{G} = 0$ va \mathcal{G} ning boshqa qiymatlariga o‘tishlardan hosil bo‘lgan spektral chiziqlarga obertonlar deyiladi. Obertonlarning chastotasi

$$v = v_0(1 - 2x)$$

$$v = 2v_0(1 - 3x)$$

$$v = 3v_0(1 - 4x)$$

$$x = \frac{hv_0}{4D}$$

Obertonlar intensivligi jihatdan asosiy tondan 4 marta kichik bo'ladi.

$$v_{g \rightarrow g^\infty} = \frac{1}{h}(E_g - E_{g^{11}})$$

Angarmonik ossillyator uchun to'liq energiya

$$E_g = \left(g + \frac{1}{2}\right)hv_0 - \frac{h^2v_0^2}{4D}\left(g + \frac{1}{2}\right)^2$$

Xulosa qilib aytganda molekulalarning tebranma harakatlari tufayli hosil bo'ladigan spektrlarini ko'rinishi juda murakkab. Shu bilan birgalikda suyuqliklardan, qattiq jismlardan to'liq ma'lumot olish mumkin [17].

Ikki atomli molekulalarning tebranma-aylanma spektrlari: Bizga ma'lumki molekulada asosan uch xil harakatni kuzatish mumkin. Aylanma, tebranma va elektron. Bu harakatlarning sodir bo'lishi uchun kerak bo'ladigan energiyalar bir-biridan farq qiladi.

$$E_{el} > E_{teb} > E_{ayl}$$

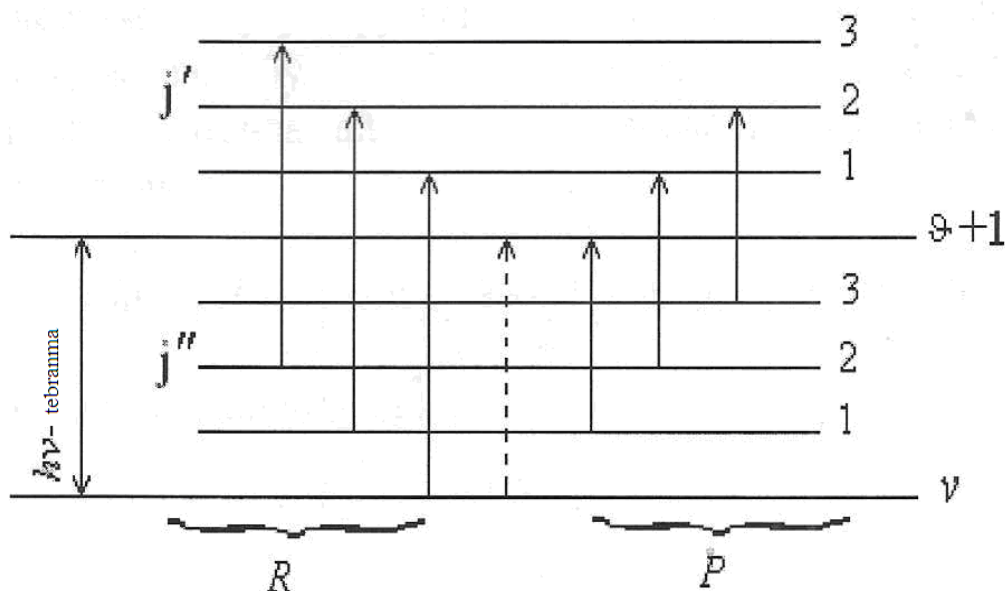
Ikki atomli molekulalarga tegishli bo'lgan tebranma harakatlarni ko'rib o'tdik, ya'ni aylanma harakatlarni hisobga olmadik.

Haqiqatdan tebranma harakatlar paydo bo'lgan joyda aylanma harakatlar paydo bo'ladi. Ikki atomli molekulaning tebranma harakatini tekshirayotganda aylanishga va tebranishga tegishli bo'lgan energiyani ideal holatda qattiq rotator va garmonik ossillyator energiyalarini yig'indisidan iborat deb qarash mumkin ya'ni

$$E_g = hv_0\left(g + \frac{1}{2}\right) + \frac{h^2}{8\pi^2I}j(j+1)$$

j - aylanish holatga tegishli kvant son, ϱ -tebranma holatga tegishli kvant sonlari

Quyidagi 1.8-rasmda tebranma va aylanma holatlarga tegishli bo'lgan o'tishlar ko'rsatilgan.



1.8-rasm. Tebranma va aylanma holatlarga tegishli bo'lgan o'tishlar

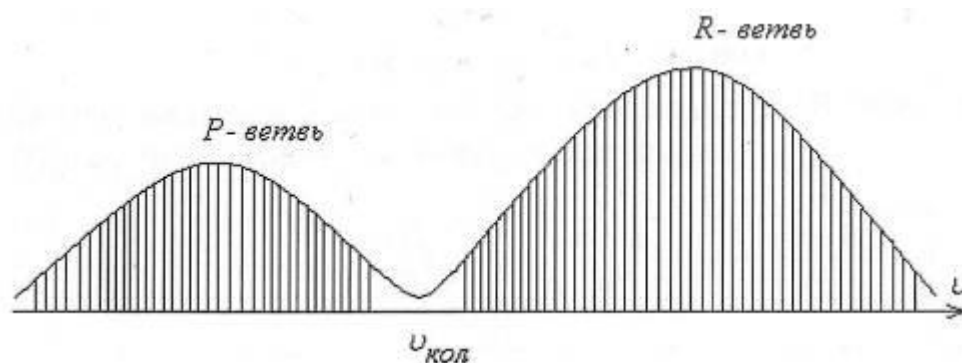
$\varrho = 0 \rightarrow \varrho = 1$ holatlar orasidagi o'tishlar bo'layotgan bo'lsin. Aylanish kvant soni uchun tanlash prinsipi $\Delta j = \pm 1$ ga asosan ikki harakat bo'lishi mumkin. $\Delta j = +1$ harakat yoki $\Delta j = -1$ harakat.

$\Delta j = +1$ qiymatiga to'g'ri keluvchi chiziqlar dastasiga R -shox deyiladi.

$\Delta j = -1$ qiymatiga to'g'ri keluvchi chiziqlar dastasiga R -shox deyiladi.

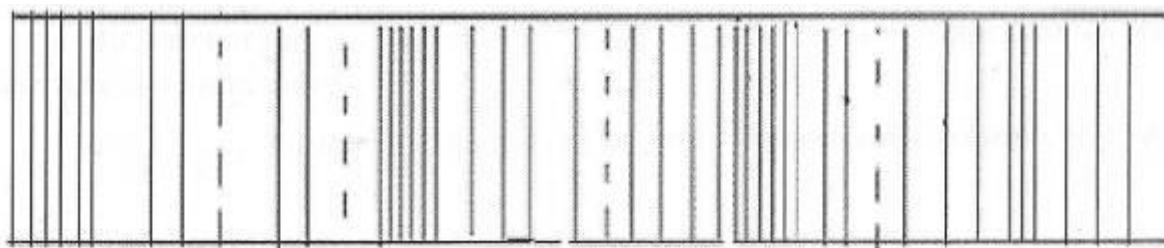
R va R -shoxlarning chastotalari bir biridan farq qiladi. Quyidagi 1.9-rasmda R va R shoxlarning spektrini ko'rinishi keltirilgan.

R va R -shoxlar asosan siyraklashtirilgan gazlarda yaxshi kuzatiladi. Ba'zi suyuqliklar va eritmalarda tashqi sharoitning ma'lum qiymatlarida (R va T) R va R shoxlar o'rniga Q shox kuzatiladi.



1.9-rasm. R va R shoxlarning spektri

Bu suyuqliklar va eritmalarining toza tebranma harakatiga to'g'ri keladi. Tebranma spektrlar aylanma spektrlarga qaraganda, yaqin infraqizil sohada joylashadi va spektral chiziqlari yo'l-yo'l ko'rinishga ega bo'ladi.



1.10-rasm. Yo'l-yo'l spektral chiziqlar

Ya'ni real molekulalarning aylanma va tebranma harakatlari bir biroviga ta'sir etadi. Shu ta'sir tufayli aylanish doimiysi B_g va hamda dissosatsiya energiyasi D_g o'zgaruvchan qiymat qabul qiladi va bu o'zgarish ma'lum qonuniyat asosida bo'ladi. Aylanma va tebranma harakatlarning o'zaro ta'sirini hisobga olganda aylanish va tebranish energiyasini quyidagi ko'rinishda yozish mumkin.

$$E_{ayl-teb} = h\nu_{teb} \left(\mathcal{J} + \frac{1}{2} \right) - h\nu_{teb} \left(\mathcal{J} + \frac{1}{2} \right)^2 + hB_g j(j+1) - hD_g j^2(j+1)^2$$

B_g - ning o'zgarish qonuni ya'ni

$$B_g = B_0 - \alpha \left(\mathcal{J} + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

$$D_g = D_0 + \beta \left(g + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

Bu formuladan $D_g = 0$ deb, katta amplitudali tebranishlarni hisobga olsak

$$E_{\text{ayl-teb}} = h\nu_{\text{teb}} \left(g + \frac{1}{2} \right) - h\nu_{\text{teb}} \left(g + \frac{1}{2} \right)^2 + hB_g j(j+1),$$

$\Delta j + 1$ da, ya'ni chiziqning chastotasi

$$\nu_{+1} = \nu_{\text{teb}} + 2B_g(j+1);$$

$\Delta j = -1$ da $\nu_{-1} = \nu_{\text{teb}} - 2B_g j$; ga teng. Quyidagi jadvalda j ning har xil qiymatlarida R hamda P shoxlarga tegishli bo'lgan chiziqlarning chastotasi keltirilgan.

1.2-jadval

j	0	1	2	3	4
R	$\nu_T + 2B_0$	$\nu_T + 4B_0$	$\nu_T + 6B_0$	$\nu_T + 8B_0$	$\nu_T + 10B_0$
P	-	$\nu_T - 2B_0$	$\nu_T - 4B_0$	$\nu_T - 6B_0$	$\nu_T - 8B_0$

1.2-jadvaldan ko'rinadiki aylanma-tebranma spektrlar gruppasi orasidagi masofa $\Delta\nu = 2B_0$ teng.

Mozli formulasi $U(q) = D_g \left[1 - e^{-a(r-r_e)} \right]^2$ ning xususiy xollari

- 1) $r \rightarrow \infty$ da $U(q) \rightarrow D_g$ da bu formulaning 2- xususiy holi
- 2) $r = r_e$ $U(q) = 0$ bo'ladi.

Molekulaning tebranma aylanma harakatlarini birgalikda qarash paytida aylanish doimiyligi.

$$B = \frac{h^2}{8\pi^2 MP^2} \text{ o'zgarib turish tufayli uning o'rtacha qiymatini olish}$$

kerak[18].

$$\bar{B} = B_g = \frac{h^2}{8\pi^2 M} \left(\frac{\bar{1}}{P_2} \right) \text{ yoki } \frac{1}{P_{\min}^2} \prec \frac{1}{P_{\text{ort}}^2} \prec \frac{1}{P_{\max}^2}$$

II BOB. Tajriba qurilmasi va metodikasi

2.1. DFS-52 spektrometrining tuzilishi va ishlash prinsipi

DFS-52 spektrometri lazer manbai yordamida yoritilgan suyuq, kristall, 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 buyoqlar tarkibi va tuzilishini o'rganadi.

Spektrometrning tarkibi: Spektrometrning tarkibiga almashtiruvchi difraksion panjarali qo'shaloq monoxromator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi, chastotametr va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluchi qurilma. ERU-53, termoelektrik sovutgichli blok manbai, alfavit raqamli va yozuvchi qurilma (programmani tayyorlash sistemasi) -15 IPG -32-003 ga kiruvchilar, laboratoriya o'zi yozuvchi asbobi LKS4-003, ulash simlari va o'tkazgichlari jamlanmasi, almashtirish va ixtiyoriy qismlari kiradi.

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

Kombinatsion sochilish spektrining intensivligi kichik bo'lib, ularni qayd qilish uchun yorug'likni kam sochuvchi monoxromatorlardan foydalanish zarur. Shuningdek, shovqini kam va yetarlicha stabil bo'lgan qayd qilishning sezgir sistemalaridan foydalanish kerak [19].

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 spektrlarining ketma-ketligi va spektral diapazonining berilgan qismida signallarning ketma-ket qayd qilinishi, olingan natijalarning matematik qayta ishlanishini va natijalarini qayd qiluvchi asbobga chiqarishini ta'minlaydi.

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

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

Yoritish sistemasi va qabul qilish bloki bo'lgan yorug'likning kombinatsion sochilishi uchun, spektrni olish va uni elektr signallariga aylantirish sochilish spektrometrning optik sxemasi 2.1-rasmda tasvirlangan. Yorug'lik manбайдan chiqqan lazerning parallel nurlar dastasi tor yo'l interferension yorug'lik filtrida, irisdiaphragmada 2, qutblanuvchi plastinkadan $3 \frac{\lambda}{2}$ yoki $\frac{\lambda}{4}$ va almashtiruvchi obyektivlarini 4 biri orqali namuna 5 tekisligiga fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish sferik linza 6 lardan biri orqali proyeksiyalovchi sistemada to'planadi va parallel dasta bo'lib obyektivga 7 yo'naladi. Linza va obyektiv 7 dan iborat proyeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qo'shaloq monoxramatorning kirish tirqishi oldida 2,3 yoki 3,5 marta kattalashtirib beradi.

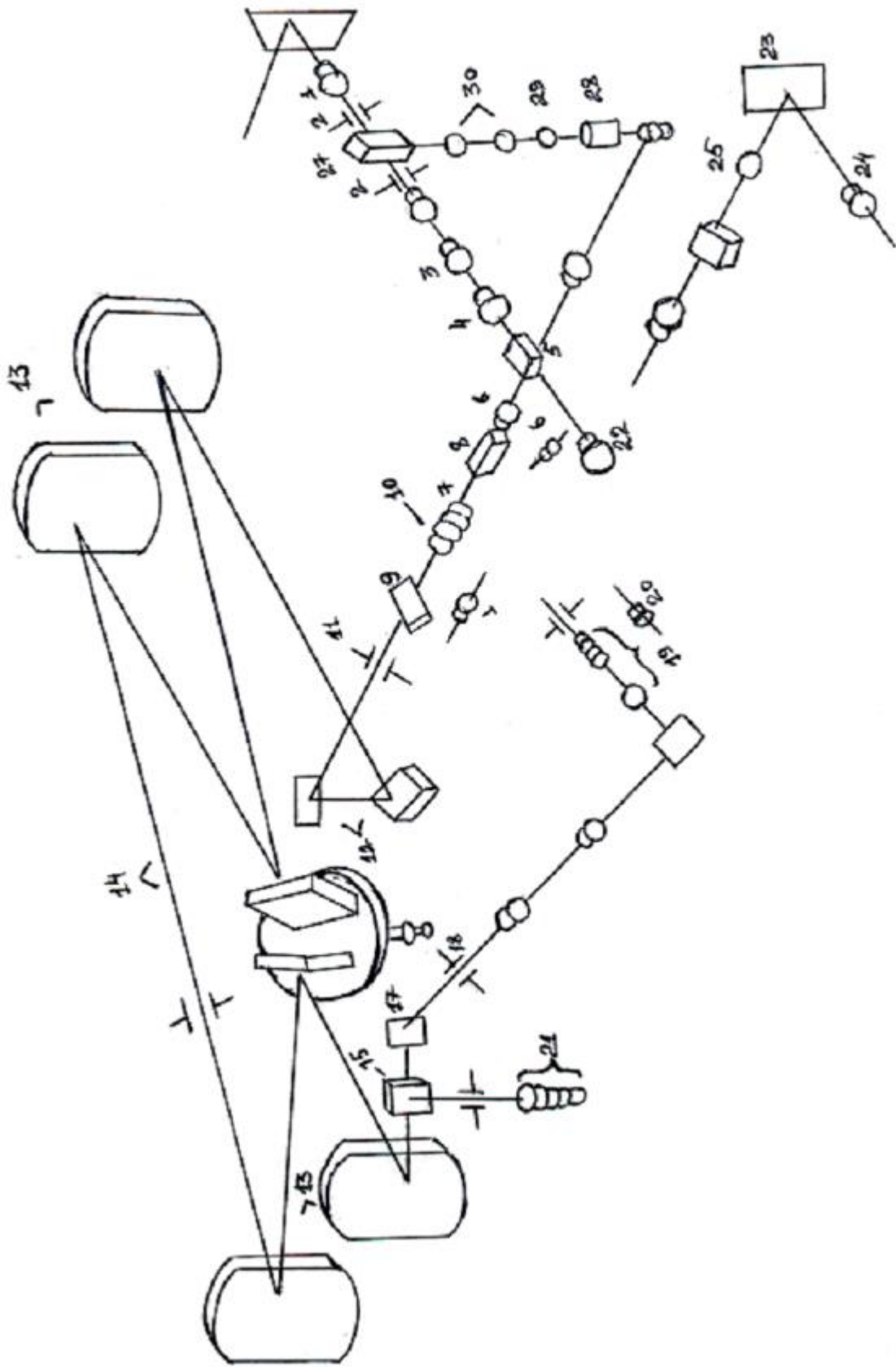
Linza 6 bilan obyektiv 7 orasida parallel nurlar dastasiga prizma-analizator 8 qo'yilishi mumkin. Polyarizatsion tekshirishlar o'tkazganda monoxramatorning

kirish tirqishi oldiga depolyarizatsiyalovchi klin 9 qo'yiladi. Yorug'lik filtri 10 spektrining 80 nm yuqori sohasida ishlaydi.

Kirish tirqishi 11 (qo'shaloq monoxromatorning) gorizontal joylashgan. Kirish tirqishining orqasiga 2 ta yassi buruvchi ko'zgudan iborat sistema 12 qo'yilgan. Bu sistema yorug'lik dastasini buradi. Monoxromatorning obyektivi 13 sifatida parabolasiimon ko'zgular 14 almashtirilishi mumkin. To'liq uzunliklarining 400-600 nm diapazonida 1800 ta chizig'i bo'lgan panjaralar ishlatiladi. Chiqishdagi buruvchi ko'zgu 15 difraksiyalangan yorug'likni chiqish tirqishiga 16 yo'naltiradi. 15 ko'zguni yorug'lik dastasi olganda buruvchi ko'zgu (17 yorug'likning chiqish tirqishining imitatoriga) 18 yo'naltiradi. Bu esa spektrning sohasini okulyar 20 li tirqish trubasi orqali kuzatish mumkin. Qabul qiluvchi blokka o'rnatilgan obyektiv 21 asbobning qorachig'ini fotoelektron ko'paytirgichining katodiga 1 dan 20 kattalashtirishda akslantiriladi.

Lazerning yorug'lik dastasiga to'la foydalanish maqsadida yoritish sistemasida shaffof moddalar bilan ishlaganda sferik ko'zgu 22 qo'yiladi. Bu esa lazer nurining moddadan qayta o'tishini ta'minlaydi. Ko'zga 23 yorug'lik dastaning namunada kuzatish yo'nalishiga qarama qarshi yo'nalishda sochilgan qismdan foydalanishini ta'minlaydi.

Shaffofmas namunalari bilan ishlash uchun buruvchi prizma 25 va qisqa fokusli linza 26 ishlatiladi. Bular lazer nurini kukun yoki sovuqlik uchun mo'ljallangan idishga proyeksiyalaydi. Plastina 27 lazer nurining 1,5-2,01 ni yorug'lik o'tkazgichning 28 kirishiga uzatadi. Yorug'lik uzatgich orqali nurlanish taqqoslash kanalining qabul qiluvchisiga uzatiladi. Bunda yorug'lik oqimi intensivligini qo'pol regulirovkasi yorug'lik dastasidagi susaytiruvchi yorug'lik filtri 29 ni kiritish bilan amalga oshiriladi, aniq regulirovkasi esa 2 ta polyaroitlar 30 ni burish bilan amalga oshiriladi [20].

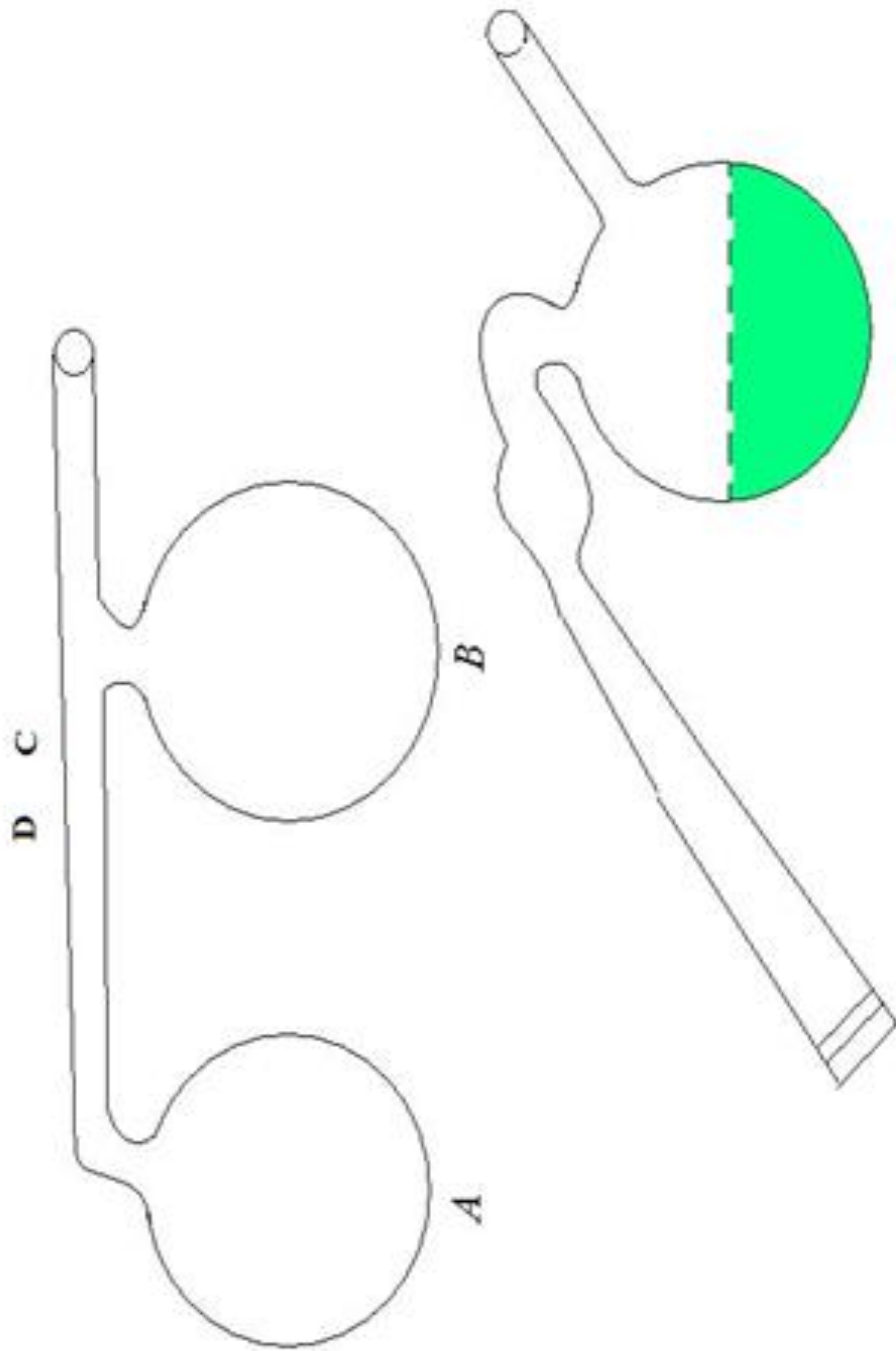


2.1- rasm.DFS-52 spektrometrining optik sxemasi

2.2. Tadqiqot obyektini tajribada tayyorlash

Obyektlarni eksperimental tayyorlash uchun o'sha tekshirilayotga namuna toza bo'lishi kerak, ya'ni chang va boshqa aralashmalardan holi bo'lishi kerak. Ozgina aralashmalar ham molekulalar sochilishidan chetlanishga olib kelishi mumkin. Tekshirilayotgan modda ximiyaviy tarkibi jihatidan ham tozalangan bo'lishi kerak. Tozalash vakuum ostida qayta haydashdan iborat bo'lib ikkita bir-biriga ulangan sharikdan iborat (2.3-rasm).

Eng avval moddani tozalashdan oldin shariklar va Vud trubkasi distrlangan suv bilan toza qilib spirt bilan chayilgandan so'ng quritish shkafida quritilgan. Tekshirilayotgan modda bir-biriga ulangan shariklardan biriga solinadi. Lekin shariklardan biri Vud trubkasiga ulanadi, ulangandan keyin shariklardan biri, ya'ni tekshirilayotgan modda solingan sharik pechkaga solinadi va ma'lum bir qaynash temperaturasigacha qizdiriladi. Natijada qizdirilayotgan sharikdagi modda solingan tarkibidagi chang zarralari suv va boshqa aralashmalar asta sekin o'sha moddaning tarkibidan chetlasha boshlaydi, ya'ni o'rganilayotgan obyekt bug'lanib shariklardan biriga o'tib ketadi. Eksperimentga tayyorlanayotgan moddani aynan shu yo'l bilan bir necha marta tozalaniladi va nihoyat o'zi alohida toza holicha qoladi. A sharikka suyuqlik quyilib uglekislota yordamida yoki quruq muz yordamida sovutilib havosi so'rib olinadi. Vakuum qilingandan so'ng C nuqtasi kavsharlanib va pechkaga qo'yilib qayta haydaladi. B sharik qayta haydalgan suyuqlik bilan kesib olinib Vud trubkasiga ulanadi. Vud trubkasiga ulangandan so'ng qayta haydash yo'li bilan tozalanadi va Vud trubkasiga o'tkaziladi, so'ng \ddot{A} nuqtadan kesib olinib Vud trubkasining tag qismi bilan yonbosh qismlaridan tashqari hamma tomoni bo'yaladi. Bundan maqsad boshqa tomonlarga sochilgan yorug'lik turlicha yutilishi uchun yuqorida aytilganidek Vud trubkasi eksperimentga tayyor hisoblanadi [20].

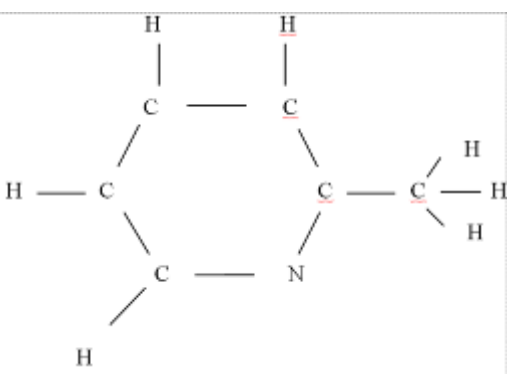
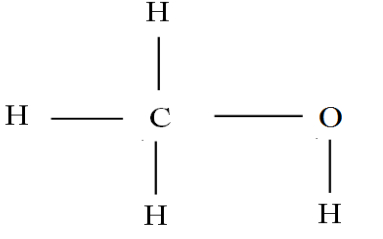


2.3-rasm. Vud trubkasi

2.3. Tajriba natijalari va ularning tahlili

α -pikolin va metil spirtlarining fizika va kimyoviy xossalari

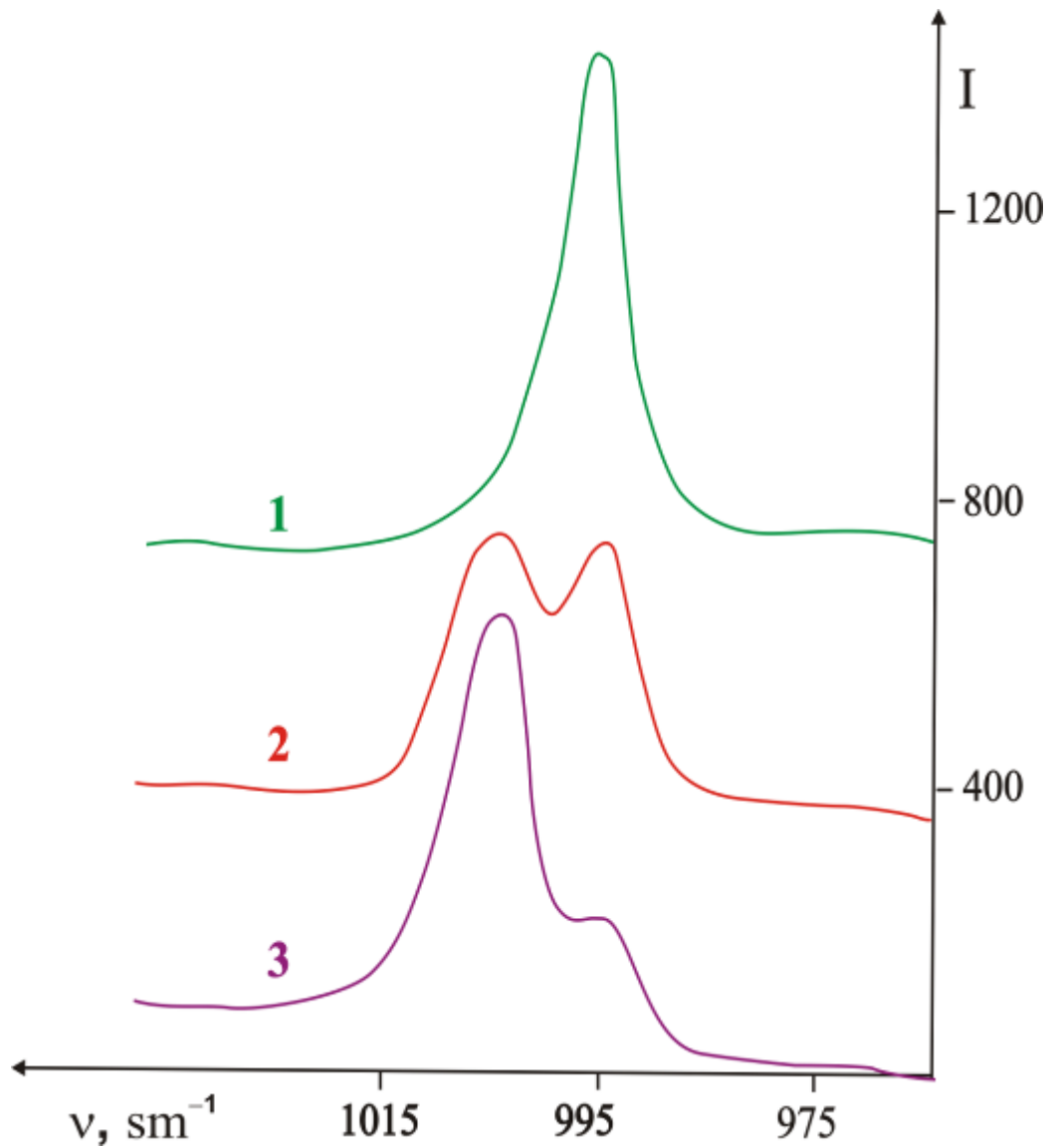
2.1-jadval [19]

O'rganil ayotgan modda	Strukturaviy tuzilishi	Ximiyaviy formulasi	Molekulyar massa	Suyuqlanish temperaturasi ($^{\circ}\text{C}$ hisobida)	Qaynash temperaturasi ($^{\circ}\text{C}$ hisobida)	Suyuq holdagi zichligi (gr/sm^3 hisobida)
α -pikolin		$\text{C}_5\text{H}_4\text{NCH}_3$	93	-66,8	128,8	5,96
metil spirti		H_3COH	32	-97,8	64,7	0,792

Tajribada α -pikolinning kombinasion sochilish spektrlaridagi 998 cm^{-1} spektral chizig'i bo'yicha o'tkazildi. Tajriba natijalariga to'xtalib o'tamiz.

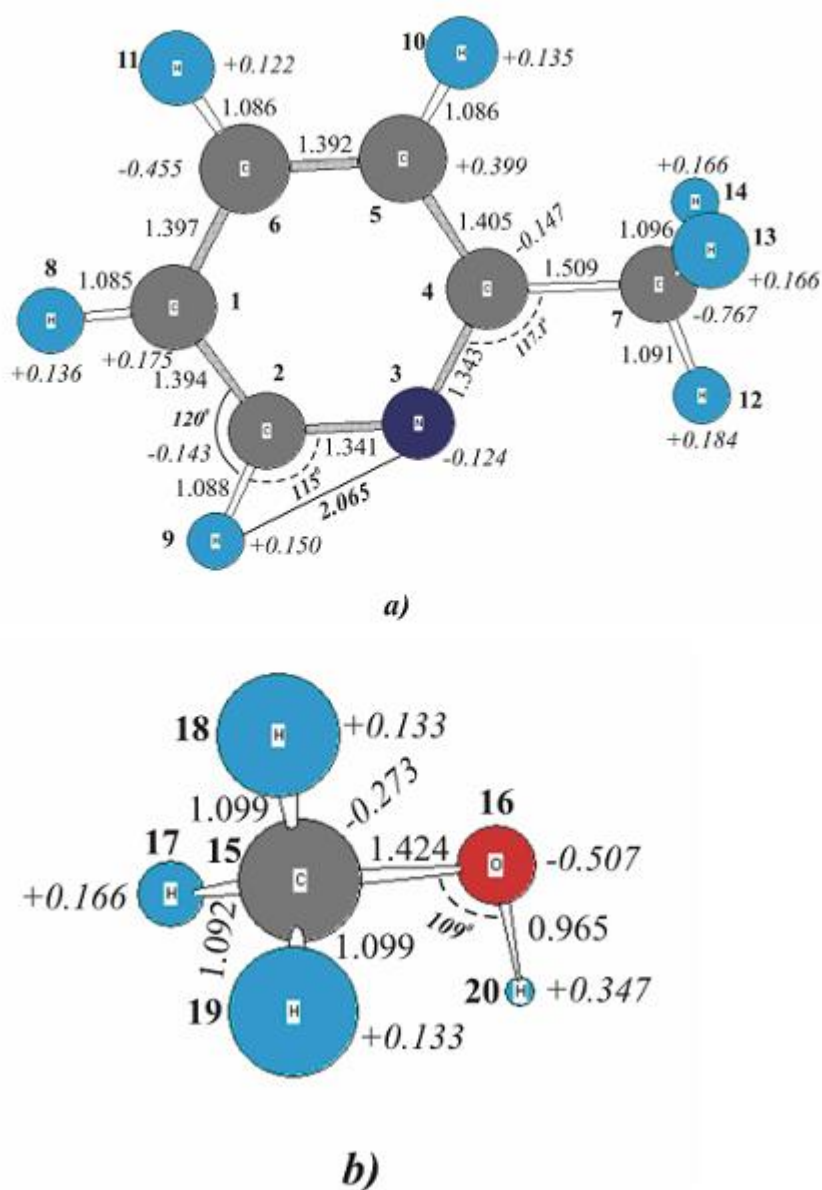
2.4-rasmda α -pikolinning kombinasion sochilish spektrlaridagi 998 cm^{-1} spektral chizig'i keltirilgan. 1-holda toza α -pikolinning 998 cm^{-1} spektral chizig'i keltirilgan bo'lib, uning yarim kengligi $3,5 \text{ cm}^{-1}$ ga teng. Spektral chizig'imiz yuqori chastota tomondan assimetriyaga ega. Bu esa polosaning murakkabligidan dalolat beradi. Bu murakkablikni tushuntirish maqsadida α -pikolinni protonodonor xususiyatiga ega bo'lgan metil spirtida eritdik. 2- holda ya'ni teng konsentrasiyada α -pikolin monomerlariga tegishli bo'lgan 998 cm^{-1} spektral chizig'imizning yaqqol namoyon bo'lganligi va α -pikolin molekulari metal spirit molekulari bilan molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida yuqori chastota tomondan turli xil tipdagi assosiatlarga tegilshi bo'lgan yangi 1005 cm^{-1} spektral chiziq hosil bo'lganligini kuzatdik [6]. Rasmdan ko'rinib turibdiki, α -pikolinning monomerlariga tegishli bo'lan kombinatsion sochilish spektrlaridagi 998 cm^{-1} spektral chiziq intensivlik jihatidan biroz kamaygan, buni biz suyuqlik tarkibida monomerlar soni kamayganligida deb tushuntirdik. Tajribani davom ettirib, α -pikolin miqdorini 0,1 m.u. ga kamaytib, metal spirit miqdorini 0,9 m.u. ga oshirganimizda (3-hol) α -pikolin molekulari monomerlariga tegishli bo'lgan 998 cm^{-1} spektral chiziqning intensivligi keskin kamayganligini va yuqori chastota tomondan turli xil tipdagi assosiatlarga tegishli 1005 cm^{-1} spektral chizig'imizning intensivligi oshganligini kuzatdik. Bu esa suyuqlik takibidagi α -pikolin molekulari metil spirti molekulari bilan molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida monomerlar soni keskin kamayib, turli xil tipdagi assosiatlar miqdori oshganligidan dalolat beradi.

Tajriba natijalaridan shuni xulosa qilish mumkinki, toza α -pikolin molekulari protonodonor xususiyatiga ega bo'lgan metil spirtida eritilganda, molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan va yuqori chastota tomondan assosiatlarga tegishli spektral chiziq hosil bo'lar ekan, bu chiziq konsentrasiya o'zgarishi bilan yana o'zgarar ekan.



2.4-rasm. α -pikolin molekulasining kombinasion sochilish spektrlaridagi 998 cm^{-1} polosasi: 1) toza α -pikolin; 2) α -pikolin va metil spirti (0,5:0,5 m.u.); 3) α -pikolin va metil spiti (0,1:0,9 m.u.).

Tajriba natijalarini to'laroq tushuntirish maqsadida kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazildi. Kvanto-kimyoviy hisoblashlar Gaussian-98 dasturida B3LYP yaqinlashishda 6-31G⁺⁺(d,p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi [21-23]. Kvanto-kimyoviy hisoblashlarda α -pikolin va metil spirti molekularning o'zaro orientatsiyasi, bog' uzunliklari, zaryadlar taqsimlanishi, depolyarizasiya koeffesiyentlari, tebranish chastotalari, dimer hosil bo'lish energiyalari aniqlandi.

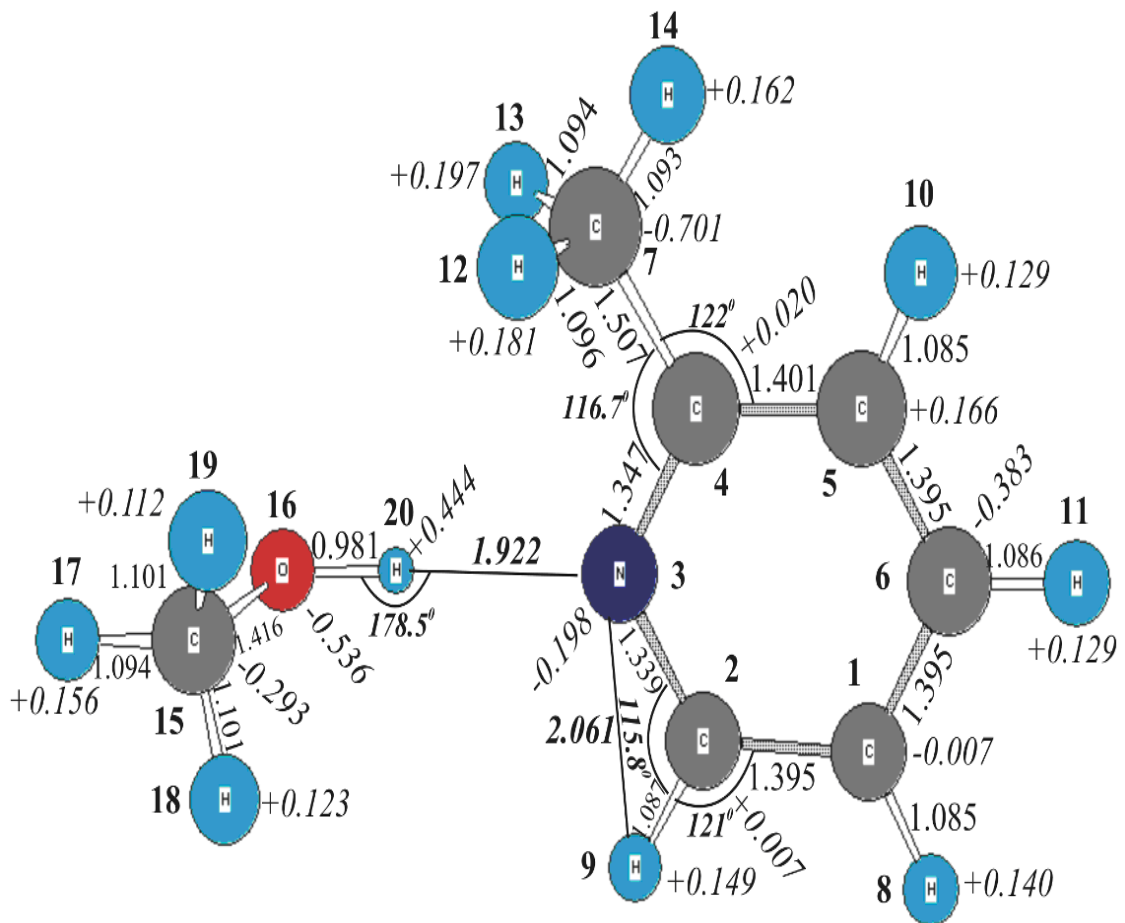


2.5-rasm. α -pikolinning kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari: a) α -pikolin molekulasini monomeri; b) metil spirt molekulasini monomeri

O'tkazilgan kvanto-kimyoviy hisoblash natijalarini tahlil qilib chiqamiz. 2.5a-rasmda α -pikolin molekulasini monomeri keltirilgan bo'lib, barcha vodorod atomlari musbat zaryadlangan azot atomi esa manfiy zaryadlangan, bunda azot atomiga qo'shni turgan H^9 va CH_3 guruhidagi vodorod atomlari zaryadlari katta. H^9N^3 atomlar orasidagi masofa 2,065 Å ga teng. Shuningdek, $H^9C^2N^3$ atomlar orasidagi burchak 115^0 ga teng bo'lsa, $C^1C^2H^9$ atomlar orasidagi burchak 120^0 ga tengdir. Demak, azot atomiga qo'shni turgan H^9 atomi azot atomi bilan kuchli o'zaro ta'sirlashadi va bog' uzunligi ham vodorod bog' uzunligiga to'g'ri keladi. Bu esa molekula ichida ichki molekulyar vodorod boglanish mavjud degan xulosaga olib keladi.

2.5-b rasmda metil spirti molekulasining monomeri keltirilgan bo'lib, bu yerda ham barcha vodorod atomlari musbat zaryadlangan OH guruhidagi vodorod atomi zaryadi eng katta, uglerod va kislorod atomlari esa manfiy zaryadlangan. $C^{15}O^{16}H^{20}$ atomlari orasidagi burchak esa 109^0 ga teng.

2.6-rasmda α -pikolin molekulasining metil spirti molekulasini bilan dimeri uchun hisoblash natijalari keltirilgan. Rasmdan ko'rinib turibdiki, α -pikolin molekulasini metil spirti molekulasini bilan molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilgan ekan. Molekulararo vodorod bog'lanish α -pikolin molekulasidagi N^3 atomi bilan metil spirtining O-H guruhidagi H^{20} atomi orasida vujudga keladi, bu bog' uzunligi 1,922 Å ga teng. Molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilgan $O^{16}H^{20}N^3$ – burchak esa $178,5^0$ ni tashkil etadi. Dimer hosil bo'lish energiyasi 5,8 kkal/molni tashkil etar ekan. α -pikolin va metil spirti molekularlari atomlari orasidagi masofalarning o'zgarganligini va zaryadlar qayta taqsimlanganligini kuzatdik. $H^9C^2N^3$ burchak $116,7^0$ ga oshganligini H^8N^3 atomlarning bog uzunligi 2,061 Å ga teng. Bu esa dimer holida ham α -pikolin molekulasini ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud bo'klishini ko'rsatdi [23].



2.6-rasm. α -pikolin va metil spirti molekularining o'zaro oriyentatsiyasi (B3LYP yaqinlashish)

Kvanto-kimyoviy hisoblash natijalaridagi α -pikolin va metil spirit molekularining dimeri uchun atomlarning bog' uzunliklari va zaryadlari 2.1- jadvalda keltirilgan.

Metil spirti monomer molekulasining bog' uzunliklari va zaryad taqsimoti

2.1-jadval

Atom nomeri	O'zaro bog' uzunligi (Å ⁰)	Atom nomeri	Zaryadi
C ¹ -C ²	1.395	C ¹	-0.007
C ¹ -H ⁸	1.085	C ²	+0.149
C ¹ -C ⁶	1.395	N ³	-0.198
C ² -N ³	1.339	C ⁴	+0.020
C ² -H ⁹	1.087	C ⁵	+0.166
N ³ -H ⁹	2.061	C ⁶	-0.383
N ³ -C ⁴	1.347	C ⁷	-0.701
C ⁴ -C ⁵	1.401	H ⁸	+0.140
C ⁴ -C ⁷	1.507	H ⁹	+0.149
C ⁵ -C ⁶	1.395	H ¹⁰	+0.129
C ⁵ -H ¹⁰	1.085	H ¹¹	+0.129
C ⁶ -H ¹¹	1.086	H ¹²	+0.181
C ⁷ -H ¹²	1.096	H ¹³	+0.197
C ⁷ -H ¹³	1.094	H ¹⁴	+0.162
C ⁷ -H ¹⁴	1.093	C ¹⁵	-0.273
C ¹⁵ -O ¹⁶	1.416	O ¹⁶	-0.507
C ¹⁵ -H ¹⁷	1.094	H ¹⁷	+0.166
C ¹⁵ -H ¹⁸	1.101	H ¹⁸	+0.133
C ¹⁵ -H ¹⁹	1.101	H ¹⁹	+0.133
O ¹⁶ -H ²⁰	0.981	H ²⁰	+0.347
N ³ -H ²⁰	1.922		

Kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari orqali quyidagicha xulosa aytish mumkin. α -pikolin molekulasidagi azot atomi o'ziga qo'shni turgan H⁹ atom bilan kuchli ta'sirlashar ekan. Bu atomlar orasidagi masofa vodorod bog' uzunligiga teng bo'lganligi uchun molekula ichida ichki vodorod bog'lanish mavjud deb

aytish mumkin. α -pikolin molekulasini metil spirti molekulasini bilan molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida ochiq strukturali dimer hosil qilar ekan. Dimer hosil bo'lish energiyasi 5,8 kkal/molni tashkil etar ekan[24-25].

XULOSA

1. α -pikolin boshqa ba'zi azotli molekulalar kabi protonodonorli molekulalar bilan molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan.
2. Molekulalararo vodorod bog'lanish hosil bo'lishi natijasida tebranish polosasi monomeriga nisbatan yuqori chastota tomonga siljir ekan. Bu siljish vodorod bog'lanishda qatnashuvchi molekulalarga bog'liq bo'lib, protonodonorlik xususiyati qancha katta bo'lsa, siljish ham shuncha katta bo'lar ekan.
3. Azot atomi bilan unga eng yaqin turgan vodorod atomi o'rtasida kuchli o'zaro ta'sir mavjud. Bu o'zaro ta'sirdagi atomlar orasidagi masofa vodorod bog' uzunligiga yaqin bo'lganligi uchun bu ta'sirni ichki vodorod bog'lanish deb aytish mumkin.
4. α -pikolin molekulalari protonodonor xususiyatiga ega bo'lgan molekulalar bilan ochiq strukturali dimerlar hosil qilar ekan. Bunday dimerlar hosil bo'lishi spektral chiziqning yanada yuqori chastota tomonga siljishiga olib kelar ekan.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Tukhvatullin F.H., Hudayberdiev B.G., Jumabaev A., Hushvaktov H.A., Absanov A.A. Aggregation of molecules in liquid pyridine and its solutions. Raman spectra and quantum-chemical calculations // J. Mol. Liq. 2010, 155, pp. 67-70.
2. Schlucker S., Singh R.K., Asthana B.P., Popp J., Kiefer W. Hydrogen-bonded pyridine–water complexes studied by density functional theory and Raman spectroscopy // J. Phys. Chem. A, 2001, 105 (43), pp 9983–9989.
3. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Москва. ИЛ, 1979. - 647 с.
4. Атаходжаев А.К., Тухватуллин Ф.Х. Спектральное распределение интенсивности крыли линии Релей рассеяния жидкостей и растворов. Т.: изд. “Фан”, 1981. -203 с.
5. Фабелинский И.А. Молекулярное рассеяние света. Москва. изд “Наука”, 1965. – 103 с.
6. Вукс М.В. Рассеяние света в газах, жидкостях и растворах. М.: изд ”ЛГУ”, 1977. – 305 с.
7. Хабибуллаев П.К., Буллавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х. и др. Динамика молекул в жидкостях. Т. изд “Фан”, 2009. – 410 с.
8. Пиментал Д., О.Мак-Клелан. Водородная связь. Л.: 1964. – 95 с
9. Qo‘liyev V.T. Optika. Т.: Fan va taraqqiyot. 2014.
10. Singh R.K., Asthana B.P., Verma A.L. Pathak C.M. Raman study of the concentration dependence of the frequency shifts and linewidth changes in a (3Cl-pyridine + methanol) system // Chem. Phys. Let., 1997. T.278. №1-3. С. 35-40.
11. Kreyenschmidt M. Eysel H.H. Asthana B.P. Study of the pyridine–methanol system using four-channel Raman spectroscopy: Concentration dependence of frequencies, line widths and integrated intensities // J. Raman Spectrosc. 1993,

- V.24, Is.10, pp. 645-652.
12. Singh R.K., Asthana B.P., Singh P.R., Chakraborty T., Verma A.L. Raman study of the vibrational relaxation of the $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ stretching mode of acrylonitrile in binary liquid mixtures with hydrogen donor solvents // J. Raman Spectrosc. 1998, 29, 7, pp. 561-566.
 13. Сагитова Э.В., Тухватуллин Ф.Х., Атаходжаев А.К. Изучения межмолекулярных взаимодействий в растворах пиколинов по спектрам комбинационного рассеяния // Опт. и спектр. 1970. Т.28. В. 3. С. 465-470.
 14. Warycha S., Rytting J.H. Vapor pressure studies of pyridine, picolines and 2,6-lutidine in isooctane // J. Solution Chem., 1984, V. 13, Is. 8, pp. 589-598.
 15. Wawer I., Warycha S. ^1H and ^{13}C NMR study of the interaction of pyridine, picolines and 2,6-dimethylpyridine with 2,2,4-trimethylpentane // Polish J. Chem. 1985, 59, pp. 565-572.
 16. Қўйлиев.Б.Т., Нурматова.Д., Останакулов.У.ва бошқалар. Суюкликларда Н-боғланишни Раман эффеќти орќали ўрганиш// Фан, тараќќиёт ва ёшлар. Илмий-амалий конференция. – Қарши, 2012. - Б. 100-105.
 17. Тухватуллин Ф.Х., Тошкенбаев У.Н., Жумабаев А., Хушваќтов Х.А., Абсанов А.А. // Журнал химическая физика. 2006. №1 (25).-С.16-20.
 18. Тухватуллин Ф.Х., Тошкенбаев У.Н., Жумабаев А., Хушваќтов Х.А., Абсанов А.А. // Узбекский физический журнал. 2004. №3 (6).-С.195-202.
 19. [http://ru.wikipedia.org/w/index.php?title= \$\alpha\$ – pikolin 1&oldid=62546756](http://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%BC-%D0%BE%D0%BA%D0%BD%D0%BC%D0%BA&oldid=62546756)
 20. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
 21. Д.Нурматова, Д.Эшнорова, Н.Мустафоева. Чумоли кислотасининг комбинацион сочилиш спектри // Илм-фан ва инновация // Илмий-амалий конференция. Қарши-2013. -22-24 б.
 22. Тухватуллин Ф.Х., Тошкенбаев У.Н., Хушваќтов Х.А., Абсанов А.А. // “Физика в Узбекистане” материалы конференции. 2005. Тошкент. 27-28 сентябрь.-С.106-107.

23. Д.Эшнорова, Н.Жуманова, Ч.Хасанова, М.Назарова Особенности агрегации молекул муравьиной кислоты. Спектры комбинационного рассеяния// Илм-фан ва инновация // Илмий-амалий конференция. Қарши-2014.
24. Замоновий физика ва астрофизиканинг долзарб муаммолари III – Республика илмий-амалий анжумани материаллари. Қарши. 2015 й.
25. 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 isssmc i-site](http://www.iop Kiev –nbp isssmc i-site)
 - <http://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=α-pikolin>