Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Факултети физика

Кафедраи оптика ва спектроскопия

МАВОДҲОИ

конференсияи байналмилалии «*Масъалаҳои актуалии физикаи муосир*» бахшида ба 80-солагии ёдбуди Арбоби илм ва техникаи Тоҷикистон, доктори илмҳои физикаю математика, профессор *Нарзиев Бозор Нарзиевич*

(18 апрели соли 2018)

МАТЕРИАЛЫ

международной конференции «*Актуальные проблемы современной физики*» посвященной 80-летию памяти Заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, доктора физико-математических наук, профессора *Нарзиева Бозора Нарзиевича*

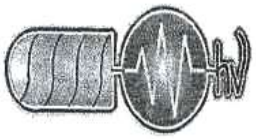
(18 апреля 2018 года)

Душанбе-2018

Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Факултети физика

Кафедраи оптика ва спектроскопия



МАВОДҲОИ

конференсияи байналмилалии «*Масъалаҳои актуалии физикаи муосир*» бахшида ба 80-солагии ёдбуди Арбоби илм ва техникаи Тоҷикистон, доктори илмҳои физикаю математика, профессор *Нарзиев Бозор Нарзиевич*

(18 апрели соли 2018)

МАТЕРИАЛЫ

международной конференции «*Актуальные проблемы современной физики*» посвященной 80-летию памяти Заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, доктора физико-математических наук, профессора *Нарзиева Бозора Нарзиевича*

(18 апреля 2018 года)

Душанбе-2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. З.З.Исломов, Д.Қ.Солиҳов ФАЪОЛИЯТИ ИЛМӢ, ТАЪЛИМӢ ВА ОМӮЗГОРИИ ПРОФЕССОР, НАРЗИЕВ БОЗОР НАРЗИЕВИЧ..... 11

2. Н.У.Муллоев, Дж.Юсупова, З.З.Исломов, М.Нуруллоев ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ МЕЖДУ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИМИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ И ПРОТОНОДОНОРНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ И ИХ ПРОЯВЛЕНИЕ В ИК-СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ..... 13

3. Н.У.Муллоев, Дж.Юсупова, З.З.Исломов ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ПРОЯВЛЕНИЕ ИНДУКЦИОННОГО ЭФФЕКТА В РАСТВОРАХ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.. 15

4.Хушвактов Х., Жумабаев А., Муродов Г., Абсанов А., Худойбердиев Б., Шарифов Г.
СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ ПИРИДИНА И ЕГО РАСТВОРОВ..... 17

5.Тохадзе К.С., Амонов А., Муродов Г., Нурмуродова Г. ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПОЛОС ГАЛОИДВОДОРОДОВ В КОМПЛЕКСАХ С ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ..... 18

6. Куйлиев Б.Т., Мейлиев Л.О., Рахмонова М.А., Хужамбердиева Ж.Н., Нормуродов Д.А., Саломов У.Э. ИССЛЕДОВАНИЕ КОНТУРОВ ПОЛОСЫ ν_1(A) МЕТАНА ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ПЛОТНОСТИ ГАЗА..... 20

7. Кулиева М.Х., Шарипова Ш.Х. ИЗУЧЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В РАСТВОРАХ ХЛОРИСТОГО ВОДОРОДА В ЖИДКОЙ УГЛЕКИСЛОТЕ..... 22

8.Шарифов Г.Н., Хушвактов Х.А., Абсанов А.А., Маматов З., Холикулов У.
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЖИДКОМ КСИЛОЛЕ И ЕГО РАСТВОРАХ. СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯИ *ab initio* РАСЧЕТЫ..... 24

9.С.Ш.Давлатмамадова, Н.У.Муллоев, Т.Шукуров МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СОСТАВНЫХ ЧАСТЕЙ ПОДОРОЖНИКА..... 25

10.**С.Ш. Давлатмамадова, Н.У. Муллоев, Т. Шукуров, Р. Марупов** ИССЛЕДОВАНИЕ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК-СПЕКТРОВ НЕКОТОРЫХ ПРИРОДНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ..... 28

11. С.Ш.Давлатмамадова, Т.Шукуров, Р.М.Марупов, Н.У.Муллоев
ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДДОВАНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТЕНИЯ ПОЛЫНЬ ГОРЬКАЯ (Artemisia absin thium L.) В ЗАВИСИМОСТИ ОТ МЕСТО ПРОИЗРАСТАНИЯ ... 30

12. Н.У.Муллоев, М.Ходиев, З.З.Исломов, М.Нуруллоев, М.Давлатов
ВЛИЯНИЕ ВВЕДЕННЫХ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦИКЛ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ..... 31

13.Н.У.Муллоев, Н.Л.Лаврик ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА САМОАССОЦИАЦИИ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ МЕТОДОМ МЕТОДОМ ТУШЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ..... 34

14.И.Х.Юсупов, С.Ш.Давлатмамадова, А.Д. Бахдавлатов, Р.Марупов
ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СПИН-МЕЧЕНОГО ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТЕНИЯ ФЕРУЛЫ ВОНЮЧЕЙ (FERULA ASSA - FOETIDA L.) В ЗАВИСИМОСЫ ОТ МЕСТА ПРОИЗРАСТАНИЯ МЕТОДОМ ЭПР..... 37

15.Ходиев М.Х, Абдулов Х.Ш., Муллоев Н.У. РАСЧЁТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО

вращательных столкновений происходит одновременно с уширением колебательно – вращательных термов, вызванным колебательной релаксацией (фазовой и энергетической), условия для которой могут меняться при изменении плотности [9].

В работе [10] показано, что на строение полосы ν_1 метана влияет резонанс Ферми с компонентами типа A_1 уровней $2\nu_2$ и $2\nu_4$, а также слабое Кориолисово взаимодействие с подуровнями типа F_1 колебания $\nu_2 + \nu_4$. Не существует теории, которая предсказывала бы влияние этих факторов на деформацию контура колебательно-вращательных полос под влиянием межмолекулярных взаимодействий.

Несомненно, что при создании теории, описывающей поведение полос изотропного рассеяния многоатомных молекул при изменении плотности следует учетовать специфику сложной молекулы как совокупность взаимодействующих осцилляторов.

Литература

1. A.D.May, J.C.Strayland. Can.J.Phys., 48, 2331, 1970.
2. T.Witkowitcz, A.D.May. Can.J.Phys., 54, 575, 1976.
3. P.DION, A.D.May. Can.J.Phys., 51, 36, 1973.
4. R.Ouillon. Chem. Phys. Lett., 35, 63, 1975.
5. А.Д.Алексеев, И.И.Собельман. ЖЭТФ, 55, 1874, 1968.
6. С.И.Темкин, А.И.Бурштейн. Письма в ЖЭТФ, 24, 99, 1976.
7. С.И.Темкин, А.И.Бурштейн. Письма в ЖЭТФ, 28, 583, 1978.
8. Куйлиев Б.Т., Орлова Н.Д., Позднякова Л.А. СамДУ Илмий тадкикотлар ахборотномаси. -Самарканд, 2006. -№ 3. – С. 54-55
9. B.T.Kuyliev, N.D.Orlova, L.A.Pozdnyakova, L.O.Meyliev, et.all. Ukrainian Journal of Physics. 2014.V.59, №3. PP. 224-227.
10. J.E.Lock., A.G.Robiette. Chem. Phys. Lett., 64, 195, 1979.

ИЗУЧЕНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В РАСТВОРАХ ХЛОРИСТОГО ВОДОРОДА В ЖИДКОЙ УГЛЕКИСЛОТЕ

Кулиева М.Х., Шарипова Ш.Х.

(СамГУ, г.Самарканд, Узбекистан)

Галоидводороды широко применяются в качестве объектов при изучении спектроскопических проявлений межмолекулярных взаимодействий в жидких растворах. Заметная протонодонорная способность молекул галоидоводородов затрудняет интерпретацию спектральных эффектов, обусловленных межмолекулярными взаимодействиями. Не смотря на то, что имеется довольно большое количество работ до сих пор отсутствуют измерения интенсивностей полос вторых обертонов всех галоидоводородов, существуют лишь единичные измерения полос обертонов HCl, HBr, HJ, точность которых неизвестна. В случаях же более подробно изученных полос основного тона HCl и HBr погрешности опубликованных величин интенсивностей в растворах достигают 15-30%.

Нами проведено измерение абсолютных интенсивностей инфракрасных спектров поглощения хлористого водорода, растворенного в жидкой углекислоте в области колебаний основного тона и первого обертона HCl при комнатной температуре. Применение в качестве растворителя сравнительно малоатомной инертной жидкости, каковым является углекислота, может быть эффективным для изучения слабых специфических взаимодействий, т.к. в этом случае удается наблюдать спектры примесных молекул в условиях предельно малых для жидкой фазы возмущений. В работе использовались кюветы высокого давления с оптическими слоями 0,5 и 2 см. Концентрации HCl в растворах, при изучении в области основного тона составляли

менее 10^{-3}, а в области первого обертона 0.05–0.1 мольных долей.

На рисунке 1 приведены ИК спектры системы HCl+CO_2 где при плотности CO_2 равном 15 амага (рис.1.,спектр 2)начинает провялятся новая полоса $\nu_1=\nu_C$(HCl) комплекса OCO...HCl. Интенсивность полосы колебания начинает расти с ростом плотности CO_2 и становится сильной при переходе к жидкому раствору (рис.1., кривая 4 и 5) Частота ν_1 максимума полосы ν_M уменьшается с 2875,6 $см^{-1}$ при $\rho(CO_2) \approx 2$ амага до 2845,2 $см^{-1}$ при $\rho(CO_2)$ 400 амага при 285 К и 2836,5 $см^{-1}$ при Т=230 К и плотности $\rho(CO_2)$=580 амага соответственно. Смещения частоты ν_1 (HCl) составляют 10,2; 40,6 и 49,3 $см^{-1}$ при $\rho(CO_2)$=2; 400 и 580 амага, соответственно. Ширина ИК полосы ν_1(HCl) в растворе уменьшается с 32 до 22 $см^{-1}$ при уменьшении температуры от 285 до 230 К.

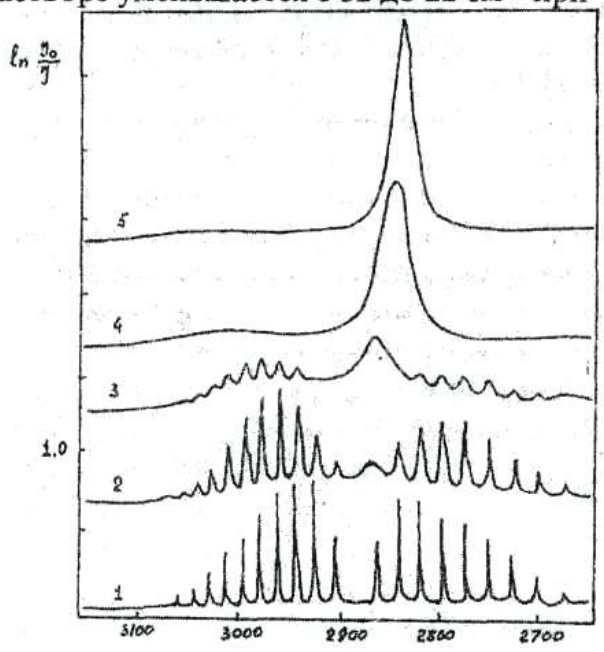


Рис. 1. ИК спектр поглощения системы HCl+CO_2 в области фундаментальной полосы ν_1(HCl), n(HCl)≈6×10^{17} молекул/$см^3$ 1-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=2 амага (газ); 2-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=15 амага (газ); 3-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=60 амага (газ); 4-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=400 амага (жидкость); 5-Т=230°К, $\rho(CO_2)$=580 амага (жидкость).

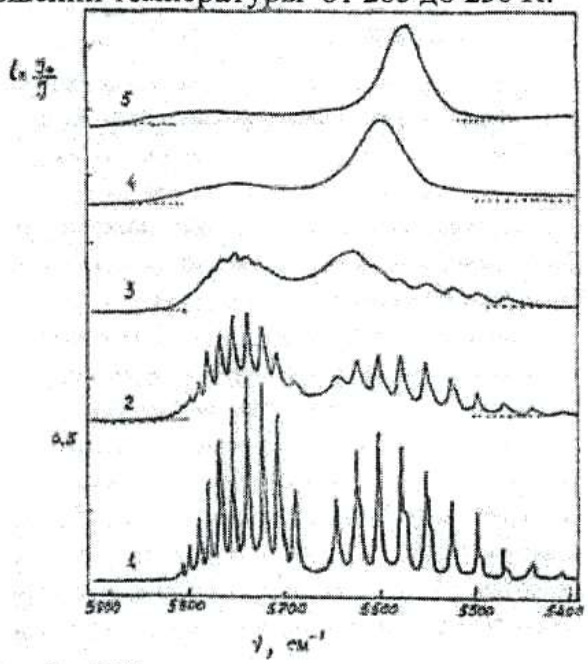


Рис.2. ИК спектр поглощения системы HCl+CO_2 в области первого обертона колебания 2ν(HCl), n(HCl)≈6×10 молекул/$см^3$ 1-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=3 амага (газ); 2-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=20 амага (газ); 3-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=80 амага (газ); 4-Т=285°К, $\rho(CO_2)$=400 Амага (жидкость); 5-Т=230°К, $\rho(CO_2)$=580 Амага (жидкость).

Сумарная интенсивность полосы ν_1(HCl) более чем в три раза больше интенсивности указанной полосы в газовой фазе.

На рис.2 показаны, как меняются ИК спектры поглощения в области первого обертона 2ν(HCl) с ростом плотности CO_2 и температуры смеси. Здесь также, как было на фундаментальной полосе ν_1(HCl), в центре появляется новый максимум, отвечающий $2\nu_C$(HCl) комплекса OCO...HCl, причем ее интенсивность растет симбатно с ростом количества CO_2. Частота максимума $2\nu_C$ (HCl)=5573 $см^{-1}$,а ширина полосы $\Delta\nu_{1/2}$=47 $см^{-1}$ при Т=230°К и $\rho(CO_2)$=580 амага, значительно превышает ширину фундаментальной полосы $\Delta\nu_{1/2}$ (ν_CHCl) = 32 $см^{-1}$. Этот факт объясняется большой постоянной ангармоничности молекул HCl. Красное смещение на полосе 2ν(HCl) составляет 38; 71 и 95 $см^{-1}$ при плотностях $\rho(CO_2)$=80; 400 и 580 амага, соответственно. Детальный анализ всех наблюдаемых полос в ИК спектрах поглощения системы HCl+CO_2 в газовой и жидкой фазах убедительно показывают
существование комплексов со слабой водородной связью OCO...HCl.

Литература

1. Ахмеджанов Р., Буланин М.О.,Булычев В.П., Пеньшин А.М.. Одновременные колебательные переходы в ИК спектрах поглощения бинарных смесей с HCl. Оптика и спектроскопия. 1991. Т.70. вып.3. с.525-531.
2. Rutkowski R.S., Tokhadze R.G., Lipkowski P., Koll A., Akhmrdjanov R., Kulieva M.Evalution of IR spectra of a weakly-bound OCO...HCl complex with increasing CO_2 density from the gas to liquid phase. J. Mol.Struc. 2001. V.598, №2-3б p.205-211.

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЖИДКОМ КСИЛОЛЕ И ЕГО РАСТВОРАХ. СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ И *ab initio* РАСЧЕТЫ

Шарифов Г.Н., Хушвактов Х.А., Абсанов А.А., Маматов З., Холикулов У.

(СамГУ, г.Самарканд, Узбекистан)

Изучение растворов ксилола в протонных растворителях актуально, тем что при образовании комплексов изменяется агрегатное состояние и протоноакцепторные свойства изучаемого объекта [1].

В данной работе приведены результаты исследования межмолекулярных взаимодействий (ММВ) в растворах м-ксилола и его растворов с нитрометаном. Для более полной интерпретации полученных результатов проведен *ab initio* расчеты чтобы определить возможность образования агрегированных межмолекулярных комплексов в жидкости.

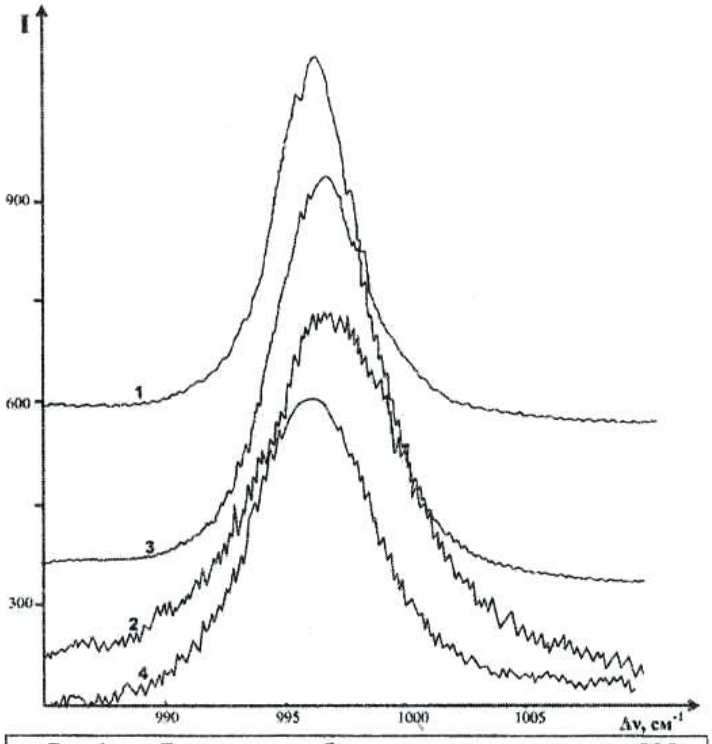


Рис.1. Спектры комбинационного рассеяния 995 $см^{-1}$ ксилола: 1) параллельная и 2) перпендикулярная составляющая соответственно: 3) и 4) ксилол +нитрометан (0,5-0,5 м.д.), (интенсивности не приведены к единому масштабу)

В качестве исследуемой полосы в спектре комбинационного рассеяния (КР) ксилола была выбрана полоса с частотой 995 $см^{-1}$. Изолированность этой полосы в спектре КР ксилола делает её особенно пригодной для исследований влияния ММВ на контур изучаемой полосы. ММВ в спектрах КР проявляется в частотном сдвиге и уширении колебательных полос. При этом изотропная и анизотропная компоненты полос КР могут обладать разной чувствительностью к процессами межмолекулярного взаимодействия [2].

Проведенные исследования показали, что в чистом ксилоле параллельная и перпендикулярная составляющие полосы 995 $см^{-1}$ сдвинутя друг относительно друга на 2,2 $см^{-1}$, анизотропная компонента сдвинута в сторону больших частот (рис.1). В чистом ксилоле (рис.1) максимум спектра наблюдается в значении 995 $см^{-1}$. Эта линия ассиметрична и смещена в сторону высоких частот. Если предположить, что спектральная линия 995 $см^{-1}$ является сложной и перпендикулярная составляющая равна полуширине спектра, эту составляющую можно объяснить с помощью вторичной ориентации молекул. Здесь уместно сказать о том, что максимумы параллельной и перпендикулярной составляющих не совпадают. Изучено поведение спектральной линии 995 $см^{-1}$ ксилола в растворах с нитрометаном. Из рисунка (рис.1) видно, что раствор ксилола с нитрометаном, при концентрации равной