

Ўзбекистон Республикаси Олий ва Ўрта махсус таълим вазирлиги

Қарши Давлат университети

Қўл ёзма ҳуқуқида
УДК.535.33/539.2

Равшанов Жасур Хушмуродович

**Азотли молекулалар ва уларнинг эритмаларида
молекулалараро ўзаро таъсир кучларини комбинацион
сочилиш спектрлари ва кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали
ўрганиш**

5A140202-физика (йўналишлар бўйича:
Оптика, магнитооптика, молекуляр оптика)

Магистр
академик даражасини олиш учун ёзилган
диссертация

Илмий раҳбар
проф. А.Жумабоев

Қарши-2015

Мундарижа

Кириш	3
I.Боб. Ёруғликнинг муҳитлардан сочилишининг назарий асослари	
1.1. Зичлик флуктуацияси ва А.Эйнштейн назарияси	9
1.2. Комбинацион сочилиш ҳодисаси ва унинг квант назарияси.....	16
1.3. Изотроп ва анизотроп муҳитлардан ёруғликнинг сочилиши.....	25
1.4. Молекулалараро ўзаро таъсир спектроскопияси.....	31
1.5. Н-боғланишни комбинацион сочилиши спектрида текшириш	37
I.боб бўйича хулоса.....	45
II.Боб. Тажриба техникаси ва методикаси	
2.1. ДФС-52 спектрометрининг оптик тузилиши ва ишлаш усули	46
2.2. Ўрганилаётган объектларни тажрибага тайёрлаш усули.....	50
2.3. Аралашмалар тайёрлаш усули.....	52
II.боб бўйича хулоса.....	54
III.Боб. Тажриба натижалари ва уларнинг таҳлили	
3.1. Ноэмпирик кванто-кимёвий ҳисоблашлар асоси	55
3.2. Пиридин ва унинг эритмаларини комбинацион сочилиш спектрлари.....	59
3.3. Кванто-кимёвий ҳисоблашлар ва тажриба натижалари таҳлили.....	65
Хулоса	70
Фойдаланилган адабиётлар	71

Кириш

Ҳозирги кунда замонавий оптика, молекуляр оптика фанларининг олдида турган асосий масалалардан бири электромагнит нурланишларни муҳит атом ва молекулалари билан таъсирлашуви натижасида содир бўладиган физик жараёнларни ўрганишдир.

Мавзунинг долзарблиги: Охириги йилларда молекула тузилишини тадқиқ қилишнинг кўп усуллари яратилди. Олинган натижалар эса умумий характерга эга. Улар асосида яратилган назариялар тажриба натижаларини сифат жиҳатдан тушунтиради. Микдорий тушунтиришда номувофиқлик кузатилади. Бу ўз навбатида мукамал назарий қарашлар яратилиши учун экспериментал тадқиқотлар янада зарур эканлигини айниқса тажриба ва назарий ҳисоблашлар биргаликда олиб борилиши мақсадга мувофиқ бўлмоқда.

Мавзунинг азотли молекулалар ва уларнинг эритмаларида молекулалараро ўзаро таъсир кучларини комбинацион сочилиш спектрлари ва кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали ўрганиш деб танланиши шу нуқтаи назардан келиб чиқилган. Чунки ҳозирги кунда суюқликлар структураси ва хоссаларини тушунтирувчи яхлит назарий ишларни яратилиши учун бундай назарий ҳисоблаш ва тажриба натижалари жуда долзарбдир. Молекулалараро ўзаро таъсирлар орасида молекулалараро водород боғланиш муҳим ўрин тутди. Молекулаларнинг бундай таъсирлашуви тирик организмлар ҳаётий фаолиятида ҳам муҳим ўрин тутди. Шунинг учун ҳам бундай тадқиқотлар катта илмий амалий аҳамиятга эга.

Тадқиқот объекти ва предмети: Тадқиқот объекти сифатида таркибида азот мавжуд бўлган модда пиридин (C_5H_5N) ва уларнинг турли эритмалари гептан (C_7H_{16}), изопропил спирти (C_3H_8O) олинган.

Пиридиннинг молекуляр агрегацияларини ўзига хос хусусиятларини ўрганиш тадқиқот предметиدير.

Ишнинг мақсад ва вазифалари: Комбинацион сочилиш спектроскопияси ва кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали таркибида азот бўлган молекулалардан иборат моддалар ва уларнинг эритмалари мисолида молекулалараро водород боғланишнинг спектрал намоён бўлишини ўрганиш.

Вазифалари:

- Мавзу бўйича мавжуд назарий ва тажриба натижалари таҳлилини ўтказиш
- Тадқиқот қурилмасини оптик тузилмасини ва ўйғотувчи манба иш услубини ўрганиш
- Тадқиқот объектларини тажрибага тайёрлаш
- Азотли молекулалардан иборат моддаларни ва уларнинг аралашмаларини комбинацион сочилиш спектрларини қайд қилиш ва қайта ишлаш
- Олинган тажриба натижаларида молекулалараро водород боғланиш табиатини аниқлаш
- Кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказиш ва ҳисоблаш натижаларини тадқиқот натижалари билан солиштириб тадқиқот натижаларини тўла асослаш

Тадқиқотнинг асосий масалалари ва фаразлари: Таркибида азот атоми мавжуд бўлган молекулалар ва уларнинг эритмаларида молекулалараро ўзаро таъсир кучларини комбинацион сочилиш спектрлари ва кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали ўрганиш, комбинацион сочилиш спектроскопиясининг ўзига хос хусусиятлари билан боғлиқ. Спектрал чизик контури шакли билан муҳит хоссаларини тавсифловчи параметрлар ўртасида алоқадорликнинг ўрнатилиши муаммони тўла тушунтиришга олиб келиши мумкин.

Фаразлар:

- Пиридин (C_5H_5N)) ва унинг эритмалари комбинацион сочилиш спектрларидаги ўзгаришларни моҳиятига етиш

- Мавжуд агрегатлар табиатини тушуниш
- Молекулалараро водород боғ борлигини аниқлаш ва уни тушуниш
- Боғ узунлиги, боғ энергияси, зарядлар тақсимотини аниқлаш ва ўзаро таъсир табиатини тушуниш
- Назарий ва экспериментал олинган натижаларни мавжуд илмий асослар асосида хулосалаш

Мавзу бўйича қисқача адабиётлар таҳлили: мавзу бўйича тадқиқотлар Самарқанд Давлат Университети оптика ва спектроскопия кафедрасидаги Академик А.К.Атаходжаев номидаги муаммолар лабораторияси билан Қарши Давлат Университети Физика кафедраси ўртасидаги ҳамкорлик шартномаси асосида бажарилган.

Бундай тадқиқотларни ўтказиш ўз қийинчиликлари билан ҳам мураккаб ҳисобланади. Қурилманинг ажрата олиш қобилиятини кичиклиги, оптик системаларда мураккаб юстровкалар ўтказиш ва ҳақозолар. Шу сабабли илмий адабиётларда мавзуга тегишли маълумотлар кўп учрамайди. Раман эффекти орқали моддалар хоссаларининг ўрганиш Санк-Петербург, Киев, Самарқанд, Ўзбекистон миллий университети ва Қарши Давлат университетларида олиб борилади ва ҳамкорликда қатор мақолалар чоп этилган. Афсуски тажриба натижаларини талқин қилишда ягона фикр мавжуд эмас. Назарий тадқиқотлар моҳиятни сифат жиҳатдан тушунтириди. Назария ва тажриба натижалари миқдорий жиҳатдан бир-биридан фарқ қилади.

Тадқиқотда қўлланиладиган услубларнинг қисқача тавсифи: Молекуляр агрегацияларга тегишли муаммоларни ечишда моддаларда ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрини ўрганиш анча эффективли хисобланади. Чунки бу усул ёрдамида кўплаб ишончли маълумотлар олиш мумкин. Тадқиқотлар автоматлаштирилган ДФС-52 спектрометрида ўтказилди. Ёруғлик манбаи сифатида $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ тўлқин узунликли, қуввати

1 Вт бўлган аргон лазери ишлатилди. Ўрганилган молекулаларнинг водород боғланиш энергияси, агрегатлар структурасини яхши тушуниш учун кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди.

Тадқиқот натижаларининг назарий ва амалий аҳамияти: Тадқиқот натижалари суюқликлар молекуляр назарияларини ривожлантиришга, тирик организмлар ҳаёт фаолиятида молекуляр агрегация ва молекулалараро таъсирлар аҳамиятини ҳисобга олишда молекулаларнинг тузилиши, спектроскопик доимийлар ва конденсирланган муҳит физикаси, атмосфера физикаси бўлимларини ривожлантиришда ҳисса қўшиши мумкин ва илмий мақолалар, маърузалар, ўқув жараёнида мутахассислик ва танлов фанларини ўқитишда фойдали бўлиши мумкин.

Бундан ташқари пиридин саноатда асосан буёқларни синтез қилишда, фармацевтикада дори воситаларининг синтезида ҳамда кўпгина органик ва баъзи бир ноорганик моддаларнинг эритувчиси сифатида ишлатилади. Пиридин заҳарли модда бўлиб, инсон асаб тизимини ишдан чиқаради ва инсон терисига таъсир кўрсатади.

Президентимиз И.А.Каримов ҳозирги давр таълимига алоҳида эътибор қаратиб, “Таълим-тарбия тизимидаги ислохотлар бошланган дастлабки йилларда мен жаҳон тажрибаси ва ҳаётда ўзини кўп бор оқлаган ҳақиқатдан келиб чиқиб, агар бу мақсадларимизни муваффақиятли равишда амалга ошира олсак, тез орада ҳаётимизда ижобий маънодаги «портлаш эффекти»га, яъни янги таълим моделининг кучли самарасига эришамиз, деган фикрни билдирган эдим. Дарҳақиқат, истиқлол даврида барпо этилган, барча шарт-шароитларга эга бўлган академик лицей ва касб-ҳунар коллежлари, олий ўқув юртларида таҳсил олаётган, замонавий касб-ҳунар ва илм-маърифат сирларини ўрганаётган, ҳозирданок икки-уч тилда бемалол гаплаша оладиган минг-минглаб ўқувчилар, катта ҳаётга кириб келаётган, ўз истеъдоди ва салоҳиятини ёрқин намоён этаётган ёш кадрларимиз мисолида ана шундай орзу-интилишларимиз бугуннинг ўзида

ўз ҳосилини бераётганининг гувоҳи бўлмоқдамиз” деган фикрни айтиб ўтган [1].

Тадқиқотнинг илмий янгилиги:

- Азотли молекулалар ва уларнинг эритмаларида комбинацион сочилиш спектри ДФС-52 спектрометрида қайд қилинди ва қайта ишланди.
- Тажриба натижаларига асосланиб азотли молекулалар ва уларнинг эритмаларида биринчи марта кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди.
- Водород боғ, боғ узунлиги ва зарядлар тақсимооти аниқланди.
- Азотли молекулалар ва уларнинг эритмаларининг мономер ва демир агрегациялари структуравий тузилиши аниқланди.
- Молекулалараро водород боғланиш борлиги аниқланди.
- Тажриба натижалари илмий манбаларга ва назарий ҳисоблар асосида хулосаланди.

Натижаларнинг ишончлилиги ва хулосаларнинг асосланганлиги:

Диссертацияда ёритилган тадқиқотлар автоматлаштирилган, ажрата олиш қобилияти юқори бўлган замонавий спектрометрда ўтказилганлиги, тажриба натижаларини мукамал тушунтириш учун назарий ҳисоблашлар ўтказилиб илмий манбалар билан солиштирилгани ва илмий нашрларда чоп этилганлиги

Муаллиф ҳиссаси: Тажриба ўтказишда ва тажриба натижаларини қайта ишлашда, муҳокамасида фаол иштирок этганлиги. Яхши назарий билимларга эга эканлиги ишни охирига етказишга қўл келди.

Иш натижаларининг муҳокамаси: Ишнинг асосий натижалари Халқаро ва Республика конференцияларида, Қарши ДУ 2014-2015 йиллар “Фан, тараққиёт ва ёшлар” конференциясида, СамДУ-2014 йил магистрларнинг 13-конференциясида, ЎзМУ-2014 йил “Физика фанининг ривожига истеъдодли ёшларнинг ўрни” республика илмий-амалий

конференциясида (Тошкент- 2014) маъруза қилинган ва Қарши ДУ Физика кафедрасида муҳокама этилган.

Иш натижалари бўйича 5 та илмий иш чоп этилган:

1. Равшанов Ж., Турдиева З., Давронов К.. Межмолекулярная водородная связь в ацетонитриле в его растворах. Спектры комбинационного рассеяния и квантово-химические расчеты// - Қарши, 2014. Илм-фан ва инновация илмий-амалий конференция материаллари.-Б. 69-72.
2. Тухватуллин Ф.Х., Қўйлиев Б.Т., Мейлиев Л.О., Равшанов Ж.Х.. Раман эффектида молекулалараро водород боғланишни намоён бўлиши// ҚаршиДУ ахборотномаси. Қарши, 2015.-№1.-Б.3-8.
3. Аликулов Ж., Равшанов Ж., Камолова М., Давронов Қ.. Сирка кислотаси ва унинг эритмаларида кванто-кимёвий ҳисоблашлар //Физика фанининг ривожига истеъдодли ёшларининг ўрни //Республика илмий-амалий конференцияси Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети. Тошкент, 2015.№8.-Б.78-84.
4. Равшанов Ж.,Турдиева З., Пармонов Ж., Давронов М., Саломов У. Спектры комбинационного рассеяния пиридина и его растворов// Физика фанининг ривожига истеъдодли ёшларининг ўрни //Республика илмий-амалий конференцияси Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети. Тошкент, 2015. №8.-Б. 52-55.
5. Jumabayev A.,Tashkenbayev U.N., Xushvaqtoev X.A.,Mamatov Z.U., Xudoyberdiyev B.G'., Toshpo'latov Q., Ubaydullayeva V., Ravshanov J. β -pikolin molekulasini agregatsiyalarini kvanto-kimyoviy hisoblashlar yordamida o'rganish//Замонавий физика ва астрофизиканинг долзарб муаммолари//III-Республика илмий-амалий анжумани. Қарши, 2015. -Б. 9-10

Ишнинг ҳажми ва тузилиши: Диссертация 72 саҳифадан иборат, компьютерда терилган матнга эга бўлиб, кириш, 3 боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхатини ўз ичига олади. Расмлар –18 та, жадваллар - 1 та, фойдаланилган адабиётлар сони -25 та

I.Боб. Ёруғликнинг муҳитлардан сочилишининг назарий асослари

1.1. Зичлик флуктуацияси ва А.Эйнштейн назарияси

Ёруғликнинг тоза моддада сочилишининг физик сабабини Смолуховский кўрсатиб берган бўлиб, қуйидагидан иборат: муҳит молекулаларининг иссиқлик ҳаракати статистик ҳарактерда бўлгани туфайли муҳитда зичлик флуктуациялари пайдо бўлади, бу флуктуациялар айниқса критик нуқта соҳасида катта бўлади. Зичликнинг $\Delta\rho$ флуктуацияси синдириш кўрсаткичининг Δn флуктуациясига ёки диэлектрик сингдирувчанликнинг $\Delta\varepsilon$ флуктуациясига ($\varepsilon \equiv n^2$) сабаб бўлади, булар эса аслида оптик биржинслимасликдан иборат.

Критик нуқтадан узоқда флуктуациялар критик нуқта соҳасидагидек унча катта бўлмаса-да ҳар қалай бўлади ва тоза моддада ёруғлик ўша флуктуациялар туфайли сочилади [2,3].

1910 йилда Эйнштейн ёруғликнинг критик нуқтадан узоқда молекуляр сочилишининг миқдорий назариясини яратди: бу назария диэлектрик сингдирувчанликнинг $\Delta\varepsilon$ флуктуациялари туфайли муҳитда оптик биржинслимаслик пайдо бўлиш ғоясига асосланади.

Бу ҳолда сочилган ёруғликнинг интенсивлиги флуктуациялар туфайли пайдо бўлган оптик биржинслимаслик билан аниқланади. Сочилган ёруғликнинг интенсивлиги $\overline{\Delta\varepsilon}$ нинг ишорасига боғлиқ бўлмагани учун интенсивлиги $(\overline{\Delta\varepsilon})^2$ га пропорционал бўлади. Оддий электродинамик ҳисоб интенсивликнинг қуйидагича бўлишини кўрсатади:

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4 L^2} V^* V (\overline{\Delta\varepsilon})^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.1)$$

Бу ерда V^* – флуктуация юз берган ҳажми бўлиб, ёруғлик тўлқинининг узунлигига нисбатан кичик, лекин ичида молекулалар кўп.

Энди ёруғликнинг молекуляр сочилишида оптик биржинслимасликнинг ўлчови $(\overline{\Delta\varepsilon})^2$ миқдор бўлади. Агар $\Delta\varepsilon$ флуктуациялар зичлик ва температура ёки P босим ва энтропиядан иборат фақат икки эркин термодинамик ўзгарувчи билан аниқланади деб ҳисобласак, у ҳолда

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\right)_S \Delta\rho + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial S}\right)_P \Delta S; \quad (\overline{\Delta\varepsilon})^2 = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\right)_S^2 (\overline{\Delta\rho})^2 + \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial S}\right)_P^2 (\overline{\Delta S})^2$$

бу ерда $\Delta\rho, \Delta S$ – босим ва энтропиянинг флуктуацион ўзгаришлари, ҳосилалардаги индекслар дифференциал олаётганда қандай миқдор ўзгартирилмай туришини кўрсатади. Бу ерда $\Delta\rho$ ва ΔS флуктуациялар статистик жиҳатдан мустақил эканлиги ва демак, $\overline{\Delta\rho\Delta S} = 0$ эканлиги эътиборга олинган. Флуктуациялар назарияси $(\overline{\Delta\rho})^2$ ва $(\overline{\Delta S})^2$ миқдорларни модданинг термодинамик характеристикалари орқали ифодалашга ва (1.1) муносабатни

$$I = I_0 \frac{\pi}{2\lambda^4} \frac{V}{L^2} \left\{ \left(\rho \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\right)_S^2 \beta_s kT + \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial\varepsilon}{\partial T}\right)_P^2 \frac{\sigma^2 kT^2}{c_p \rho} \right\} (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.2)$$

тасвирлашга имкон беради, бу ерда ρ – муҳитнинг зичлиги (г/см^3), T – абсолют температура, β_s – адиабатик сиқилувчанлик, σ – иссиқликдан кенгайиш коэффициентини, c_p – 1г модданинг ўзгармас босим шароитда иссиқлик сиғими, V – ёруғликни сочиб юбораётган ҳажм.

(1.2) формулада катта қавс ичидаги биринчи ҳад зичликнинг адиабатик флуктуациялар (босим флуктуациялари) туфайли сочилган ёруғлик интенсивлигини билдиради, иккинчи ҳад эса зичликнинг изобарик флуктуациялари (энтропия флуктуациялари) туфайли сочилган ёруғлик интенсивлигини билдиради. Қуйидаги таркибий тенгликни ёзиш мумкин:

$$\left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_s \approx \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_p \approx \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_T.$$

Агар машхур $\beta_T = \beta_s + \frac{T\sigma^2}{\rho c_p}$ термодинамик муносабатдан фойдалансак (бу

ерда β_T - изотермик сиқилувчанлик), (1.2) формула

$$I = I_0 \frac{\pi V}{2\lambda^4 L^2} \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}\right)_T^2 \beta k T (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.3)$$

кўринишга келади; бу формулани биринчи бўлиб Эйнштейн топган ва шунинг учун у Эйнштейн формуласи дейилади.

(1.2) ва (1.3) формулалардан Релейнинг $I \sim 1/\lambda^4$ қонуни келиб чиқади. Шундай қилиб, осмоннинг зангори бўлишига ва ботишда Қуёшнинг қизил бўлиб кўринишига ёруғликнинг молекуляр сочилиши сабаб бўлади. Идеал газ ҳолатининг тенгламасини ва ε ва ρ орасидаги муносабатни эътиборга олиб, (1.3) формуладан (Релейнинг дастлабки формуласи) келтириб чиқариш мумкин. Эйнштейн оптик биржинслимасликка эриган модда концентрациянинг флуктуациялари сабаб бўладиган ҳолни ҳам кўриб чиқамиз (бунда диэлектрик сингдирувчанлик концентрацияга боғлиқ деб ҳисобланади). Бу ҳолда

$$\Delta \varepsilon = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial c}\right)_{p,s} \Delta c; \quad \overline{(\Delta \varepsilon)^2} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial c}\right)_{p,s}^2 \overline{(\Delta c)^2}$$

Бу ерда c — концентрация, Δc — концентрация флуктуацияси.

Оддийгина ҳисобнинг кўрсатишича, концентрация флуктуациялари туфайли сочилган ёруғликнинг интенсивлиги қуйидагича ифодаланади:

$$I_{kons.} = I_0 \frac{\pi^2 V}{2\lambda^4 L^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial c}\right)_{p,s}^2 \frac{cM}{N_A} (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.4)$$

бу ерда M -эриган модданинг молекуляр оғирлиги, N_A — Авогадро сони. Бу формула унча катта бўлмаган концентрациялар учун яради.

Эйнштейн назариясини ёруғликнинг турли хил полимер ва оқсилларда сочилиш ҳолига татбиқ этиб ривожлантириш (Дебай) ўлчамлари тушаётган

ёруғлик тўлқинининг узунлиги тартибида (ёки ундан катта) бўлган полимер молекулаларнинг молекуляр оғирлиги ва тузилишини аниқлашнинг энг яхши усулларида бирини берди. Зичлик флуктуациялари ва концентрация флуктуациялари туфайли сочилган ёруғлик бутунлай чизикли қутбланган бўлади.

Идеал тоза муҳитларда оптик биржинслимаслик юзага келишининг физик сабаби бирданига топилгани йўқ. Жуда муҳим бўлган бир хусусий ҳолда бир жинслиликни бузилишига олиб келадиган сабабини М.Смолуховский (1908 йил) кўрсатиб берди. Газ ёки суюқликнинг критик температурасида ёруғлик интенсив равишда сочилиши (критик опалесценция) кўпдан бери маълум эди. Смолуховский критик температурада муҳитнинг сиқилувчанлиги жуда катта эканлигига диққат қилди (критик нуқтада назарий томондан $\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ катта бўлиши иссиқлик ҳаракати кичик ҳажмлардан ифода чексизликка интилади). Бундай шароитларда кичикроқ ҳажмларда ўртача зичликдан сезиларли четланишлар пайдо бўлиши мумкин, чунки сиқилувчанликнинг зичликнинг сезиларли вариацияларини (зичлик флуктуациялари) юзага келтиришга қодир эканлигини билдиради. Оптик бир жинслиликнинг бунинг оқибатида бўладиган бузилиши ёруғликнинг кўп сочилишига сабаб бўлади. Смолуховский критик опалесценция ҳодисасини изоҳлаб бериб, шу билан ёруғликнинг умуман сочилишига олиб келадиган бир жинслиликнинг бузилиш сабабини қаердан излаш кераклигига кўрсатма берди, у қуйидагича: муҳит молекулаларининг иссиқлик ҳаракати статистик характерда бўлгани туфайли муҳитда зичлик флуктуациялари пайдо бўлади, бу флуктуациялар айниқса критик нуқта соҳасида катта бўлади. Зичликнинг $\Delta\rho$ флуктуацияси синдириш кўрсаткичининг Δn флуктуациясига ёки диэлектрик синдирувчанликнинг $\Delta\varepsilon$ флуктуациясига ($\varepsilon \equiv n^2$) сабаб бўлади, бу эса аслида оптик бир жинслимасликдан иборат.

Критик нуктадан узоқда флуктуациялар критик нукта соҳасидагидек унча катта бўлмасада ҳар қалай бўлади ва тоза моддада ёруғлик ўша флуктуациялар туфайли сочилади.

Эйнштейн назарияси

1910 йилда Эйнштейн ёруғликнинг критик нуктадан узоқда молекуляр сочилишининг миқдорий назариясини яратди: бу назария диэлектрик сингдирувчанликнинг $\Delta\varepsilon$ флуктуациялари туфайли муҳитда оптик бир жинслимаслик пайдо бўлиш ғоясига асосланади.

Бу ҳолда сочилган ёруғликнинг интенсивлиги флуктуациялар туфайли пайдо бўлган оптик бир жинслимаслик билан аниқланади. Сочилган ёруғликнинг интенсивлиги $\overline{\Delta\varepsilon}$ нинг ишорасига боғлиқ бўлмагани учун интенсивлик $(\overline{\Delta\varepsilon})^2$ га пропорционал бўлади. Оддий электродинамик ҳисоб интенсивликнинг қуйидагича бўлишини кўрсатади:

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4 L^2} V^* V (\overline{\Delta\varepsilon})^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.5)$$

Бунда V^* - флуктуация юз берган ҳажм бўлиб, ёруғлик тўлкинининг узунлигига нисбатан кичик, лекин ичида молекулалар кўп. Энди ёруғликнинг молекуляр сочилишида оптик бир жинслимасликнинг ўлчови $(\overline{\Delta\varepsilon})^2$ миқдор бўлади. Агар $\Delta\varepsilon$ флуктуациялар зичлик ва температура ёки P босим ва S энтропиядан иборат фақат икки эркин термодинамик ўзгарувчи билан аниқланади деб ҳисобласак, у ҳолда

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right)_S \Delta p + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial S} \right)_p \Delta S$$

$$(\overline{\Delta\varepsilon})^2 = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right)_S^2 (\overline{\Delta p})^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial S} \right)_p^2 (\overline{\Delta S})^2$$

бу ерда $\Delta p, \Delta S$ - босим ва энтропиянинг флуктуацион ўзгаришлари, ҳосилалардаги индекслар дифференциал олаётганда қандай миқдор

ўзгартирилмай туришини кўрсатади. Бу ерда Δp ва ΔS флуктуациялар статистик жиҳатдан мустақил эканлиги ва демак, $\overline{\Delta p \Delta S} = 0$ эканлиги эътиборга олинган. Флуктуациялар назарияси $\overline{(\Delta p)^2}$ ва $\overline{(\Delta S)^2}$ миқдорларни модданинг термодинамик характеристикалари орқали ифодалашга ва (1.5) муносабатни

$$I = I_0 \frac{\pi}{2\lambda^4} \frac{V}{L^2} \left\{ \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_s^2 \beta_s kT + \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_p^2 \frac{\sigma^2 kT^2}{C_p \rho} \right\} (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.6)$$

кўринишда тасвирлашга имкон беради, бу ерда ρ - муҳитнинг зичлиги (г/см³), T - абсолют температура, β_s - адибатик сиқилувчанлик, σ - иссиқликдан кенгайиш коэффиценти, C_p - 1 г модданинг ўзгармас босим шароитидаги иссиқлик сиғим, V - ёруғликни сочиб юбораётган ҳажм.

(1.6) формулада катта қавс ичидаги биринчи ҳад зичликнинг адибатик флуктуациялари (босим флуктуациялари) туфайли сочилган ёруғлик интенсивлигини билдиради, иккинчи ҳад эса зичликнинг изобарик флуктуациялари (энтропия флуктуациялари) туфайли сочилган ёруғлик интенсивлигини билдиради [2]. Қуйидаги тақрибий тенгликни ёзиш мумкин:

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

Агар машхур $\beta_T = \beta_s + \left| \frac{T \sigma^2}{\rho C_p} \right|$ термодинамик муносабатдан

фойдалансак бу ерда β_T - изотермик сиқилувчанлик формуласи

$$I = I_0 \frac{\pi}{2\lambda^4} \frac{V}{L^2} \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_T^2 \beta_T kT (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.7)$$

кўринишга келади; бу формулани биринчи бўлиб Эйнштейн топган ва шунинг учун у Эйнштейн формуласи дейилади.

1.2. Ёруғликнинг комбинацион сочилиши ва унинг квант назарияси

Планкнинг квантлар ғоясига биноан жисмларнинг нурланиш энергиясини ютиш ва чиқариш жараёни узлукли равишда юз беради. Бу ғоя классик механика ва классик статистика еча олмаган иссиқлик нурланиши муаммосини ҳал қилиб жисмлар иссиқлик нурланишининг тугал назариясини яратишга олиб келди. Шу давргача физикавий катталиклар фақат узлуксиз ўзгарувчи катталиклар ҳисобланар эди. Узлуксиз катталиклар ўрнига узлукли, дескрет ўзгарувчи катталиклар киритилиши фан тарихида катта ўзгариш ясади.

Лекин Планк ғояси ёруғликнинг классик электродинамика назариясини тамомила янги асосга кўчириш зарурлигини кўрсатмади. Планк ғоясига биноан нурланиш энергиясининг жисмларда ютилиш ва чиқарилиш жараёни янги асосда тушунтирилса ҳам, лекин нурланишнинг тарқалиш жараёнлари ҳали ҳам классик назария қонунларига бўйсунганича қолган эди. Планк ғояси нурланишнинг, яъни ёруғликнинг табиати ҳақида ҳеч қандай маълумот бермади.

1905 йил Альберт Эйнштейн ўзининг учта машҳур илмий ишларини эълон қилди. Шулардан бири ташқи фотоэффектга оид эди. Бу ишида Эйнштейн Планкнинг нурланиш квантлари ғоясини янада олға суриб, квант хусусият умуман ёруғликка тегишли хусусиятдир, деб ҳисоблашни таклиф этди. Эйнштейннинг ёруғлик квантлари ҳақидаги ғоясига биноан ёруғлик $h\nu$ энергияга эга ва ёруғлик тезлигида ҳаракат қилувчи квантлардан-фотонлардан иборатдир ва у фотонлар тарзида нурланади, тарқалади, ютилади, яъни у фотонлар сифатида мавжуддир. Фотонлар ғояси Планкнинг революцион квантлар ғоясининг маҳсули бўлиб, ўта дадил фикр эди. У квантлар проблемасини ёруғликни порцияларидан, улушларидан иборатлигини бевосита исботлаш билан ечишни талаб қилар эди.

XX аср бошларида ёруғликнинг классик тўлқин назарияси асосида тушунтириб бўлмаган бир қатор экспериментлар мавжуд эди. Фотонлар ғоясининг тўғрилиги шу экспериментларни тушунтириш билан исботланди. Бунинг учун меҳаник (кинетик) энергияга ёруғлик энергияси тўғридан тўғри айланишини амалга оширадиган фотоэффект (Г.Герц 1887, А.Г.Столетов 1888-1889, Ленард 1898-1902) эксперимент натижаларини исботлади [2].

Раман, Г.С.Ландсберг ва Л.И.Мандельштам текширишларининг кўрсатишича сочилган ёруғлик спектрида тушаётган ёруғликни характерлайдиган чизиқлардан ташқари қўшимча чизиқлар (йўлдошлар) борлиги, булар тушаётган ёруғликнинг ҳар бир чизиғи ёнида туриши маълум бўлди. Йўлдошлар тушаётган ёруғликнинг ҳар қандай спектрал чизиғи ёнида келгани учун, бу йўлдошларни қандай шароитда пайқаш мумкин, деган савол туғилади. Йўлдошлар кўринадиган бўлиши учун тушаётган ёруғлик спектри туташ спектр бўлмай, балки алоҳида чизиқлар (монохроматик чизиқлар) тўпламидан иборат бўлиши керак. Бу ҳодисанинг қуйидаги қонунлари тажрибадан топилган. Йўлдошлар тушаётган ёруғликнинг ҳар бир чизиғи ёнида бўлади. Уйғотувчи (тушаётган) ёруғлик спектрал чизиғининг ν_0 частотаси билан йўлдошлардан ҳар бир чизиқларнинг $\nu', \nu'', \nu''' \dots$ частоталари орасидаги $\Delta\nu$ фарқ сочувчи модда учун характерли бўлиб, унинг молекулаларининг хусусий тебранишлари частоталарига (ν^i) тенг:

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

Йўлдошлар уйғотувчи чизиқдан икки томонда симметрик ётувчи чизиқларнинг икки системасидан иборат, яъни

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

Бу ерда ν_r частота уйғотувчи частоталардан узунроқ тўлқинли томонда жойлашган йўлдошларнинг частоталарини, ν_ν частота эса уйғотувчи

частоталардан иккинчи томонда ётган йўлдошларнинг частоталарини билдиради. Спектрнинг қизил қисмига яқин жойлашган ва шунинг учун «қизил» йўлдошлар деб аталадиган биринчи йўлдошлар «бинафша» йўлдошлардан анча интенсивдир. Температура кўтарилганда «бинафша» йўлдошларнинг интенсивлиги тез ортади.

Йўлдошларнинг пайдо бўлиш сабабларини ёруғлик тўлқинини сочувчи муҳит молекуласи атомларининг паст частотали тебранишлари билан модуляцияланиши орқали тушунтириш мумкин. Молекуланинг қутбланиши, умуман қараганда уни ташкил қилган атомларнинг жойлашишига боғлиқ. Атомлар тебранганда қутбланиш α - ўртача қиймат атрофида шу тебранишди буни қуйидагича изоҳлаш мумкин:

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

Ушбу тебранишларнинг частотаси $10^{12} - 10^{13}$ Гц бўлиб, электромагнит тўлқин шкаласининг инфрақизил спектри соҳасига тўғри келади. Бошқача айтганда, катталикни ўзгариши тушаётган ёруғликнинг ($\approx 10^{15}$ гц) электр майдоннинг тебранишига нисбатан секинроқ ўзгаради. Шу сабабга кўра ҳам тушаётган ёруғлик тўлқининг монохроматик майдонида молекуланинг дипол моментини ўзгариши

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

конун бўйича рўй беради, яъни амплитудаси модуляцияланган тебранишдан иборат бўлади. Бу ерда $E = E_0 \cos \omega t$ - ёруғлик тўлқинининг ўзгаручан электр майдони, E_0 -ёруғлик тўлқини электр майдони кучланганлигини амплитудаси, $\omega = 2\pi\nu$ - тушаётган ёруғликнинг бурчак частотаси, α - молекуланинг қутбланувчанлиги, фақат унинг тузилиши ва хоссасига боғлиқ бўлган доимий [3-6].

Бу жараёнда сочилган ёруғлик майдон кучланганлигининг тебраниши ҳам модуляцияланади. Бу тебранишларнинг элтувчи частотаси тушаётган ёруғлик тўлқининг частотаси ω га тенг, модуляция эса ω_i - частоталарда (сочувчи модда молекуласидаги атомларнинг тебраниш частотаси) юз

беради. Амплитудаси модуляцияланган бундай тебранишларнинг спектри ω - частотали элтувчи частота билан бир қаторда $\omega \pm \omega_i$, частотага эга бўлган комбинацион тебранишлар ҳосил бўлади. Бошқа сўз билан айтганда сочилган ёруғликнинг спектри шу молекула ҳақида ахборот беради. Бу спектрни ўрганиш ва таҳлил этиш орқали молекула структураси ва тузилишини билишга мувофақ бўламиз.

Классик электродинамика қонунига биноан, $\omega = 2\pi\nu$ частотада тебранаётган дипол интенсивлиги

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

га тенг бўлган монохроматик нур чиқаради.

Шундай қилиб, классик электродинамика сочилган ёруғлик спектрида силжимаган чизикнинг (ν) ҳар икки томонида ν_i масофага симметрик силжиган чизиклар – йўлдошларни пайдо бўлишини тўғри тушунтириб беради ва уларнинг интенсивлиги

$$I_{s,A} = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_R^{S,A})^4 \alpha^4 E_0^2 = \frac{4\pi^4}{3C^2} (\nu_0 \mp \nu_i)^4 \alpha^4 E_0^2 \quad (1.8)$$

формула билан ҳисобланади. Бунда $\nu_R^{S,A}$ - **Раман** частотаси (стокс ва антистокс чизиклари учун). Буни қуйидаги кўринишда ҳам ифодалаш мумкин комбинацион сочилиш пайтида эса муҳитга тушаётган частота билан биргаликда унга нисбатан икки томондан симметрик жойлашган кўшимча частоталар ҳам ҳосил бўлади. Кўшимча ҳосил бўлган частотанинг қиймати тушаётган частота ν_0 ва молекуланинг хусусий айланиш ва тебраниш $\nu_{айл}, \nu_{меб}$ частоталари комбинациясидан иборат.

Комбинацион сочилишда асосий рол ўйнайдиган молекулаларнинг параметрларидан бири $\alpha \rightarrow$ кутбланувчанлик коэффициенти ўз навбатида α ташқи майдон кучланганлиги E -га боғлиқ ёки

$$\mu = \alpha E$$

$$\mu = \alpha E = \alpha E_0 \cos 2\pi\nu_{меб} t \quad (1.9)$$

яъни кутбланувчанлик коэффиценти хам маълум контурлар асосида ўзгариб туради, бошқача қилиб айтганда кутбланувчанлик коэффиценти координатанинг функциясидир.

Кутбланувчанлик коэффицентиға ўхшаган дипол моментининг хам қийматини қуйидагича ёзиш мумкин.

$$\begin{aligned} \mu(r) = & C_1^{11} \cos 2\pi\nu_0 t + C_2^{11} \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r} \cos 2\pi(\nu_0 + \nu_{me\delta}) t + C_2^{11} \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r_e} \\ & \cos 2\pi(\nu_0 - \nu_{\delta\dot{a}\dot{a}}) t + C_3^{11} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right) \cos 2\pi(\nu_0 + 2\nu_{\delta\dot{a}\dot{a}}) t + C_3^{11} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_e} \cos 2\pi(\nu_0 - 2\nu_{\delta\dot{a}\dot{a}}) t + \dots \end{aligned} \quad (1.12)$$

Сочилиш спектрида ν_0 частота билан биргаликда (Релейча сочилишга ўхшаган) $\nu_0 + \nu_{me\delta}$, $\nu_0 - \nu_{me\delta}$, $\nu_0 + 2\nu_{me\delta}$, $\nu_0 - 2\nu_{me\delta}$ частоталар ҳосил бўлади $\nu_0 - \nu_{me\delta}$, $\nu_0 - 2\nu_{me\delta}$ – частоталарга стокс частоталари ёки стокс чизиқлари частотаси хам дейилади. $\nu_0 + \nu_{me\delta}$, $\nu_0 + 2\nu_{me\delta}$ – антистокс частоталари дейилади. Стокс ва антистокс чизиқларининг интенсивликлари стокс чизиқларининг интенсивликларига нисбатан кичик бўлади. Бунинг асосий сабаби шундан иборатки молекулаларнинг асосий қисми уйғонмаган ҳолатда бўлади. Антистокс чизиқларининг интенсивликлари уйғонган ҳолатдаги молекулалар билан боғлиқ.

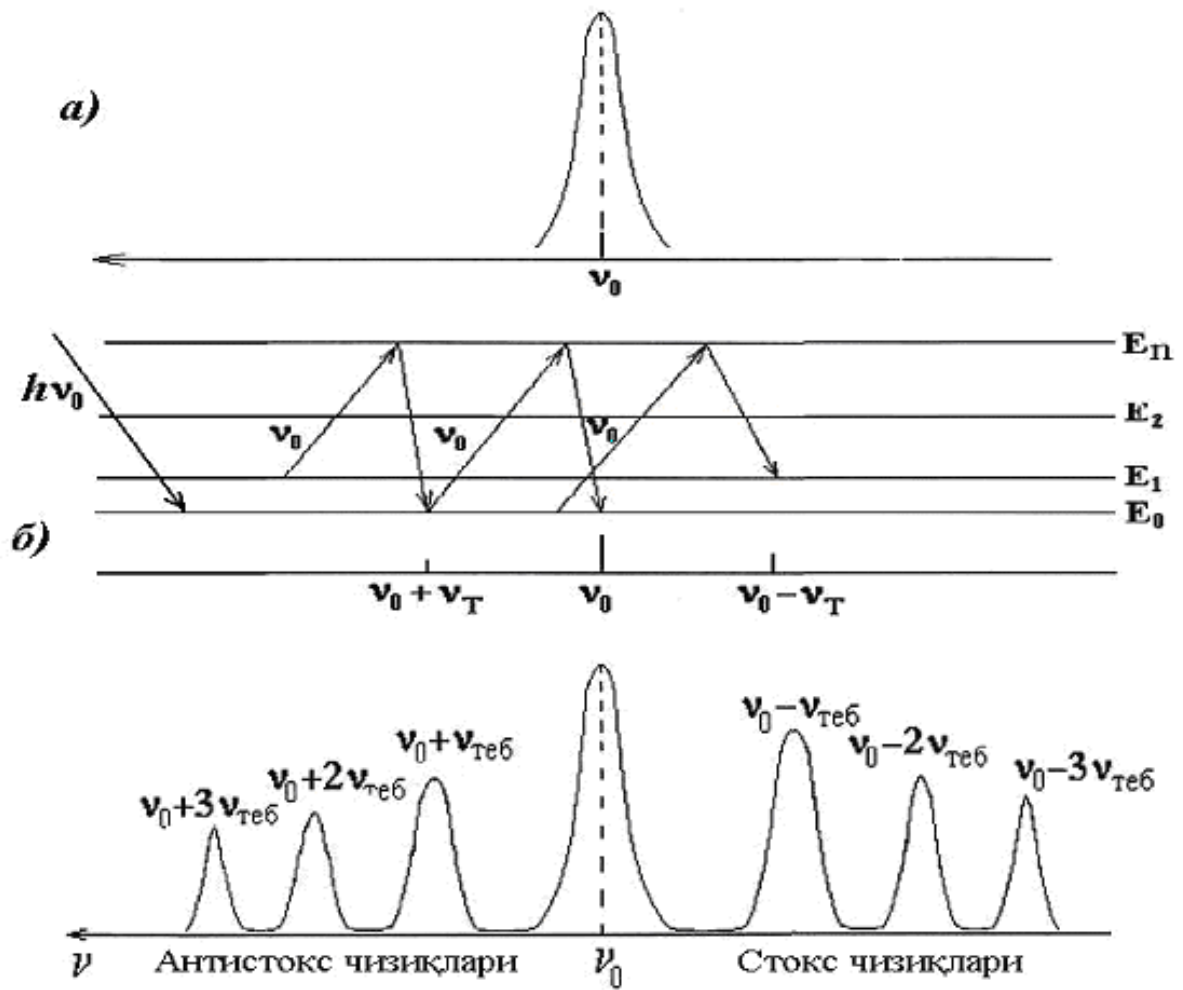
Мумтоз электродинамика нуқтаи назаридан стокс ва антистокс чизиқларининг интенсивлиги тенг эканлиги келиб чиқади. Эксперимент натижаларидан яхши биламизки, ушбу чизиқларнинг (йўлдошларнинг) интенсивлиги тенг эмас, жумладан қизил йўлдошлар-стокс чизиқларининг интенсивлиги бинафша йўлдошларнинг интенсивлигидан юқори эканлигини кўрсатади.

Ёруғликни комбинацион сочилишини квант назарияси. Квант тасаввурларига асосан, ν_0 частотали ёруғлик маълум бир улушлар (квантлар) тарзида тарқалиб, буларнинг миқдори $h\nu_0$ га тенг бу ерда $h=6.62 \cdot 10^{-34}$ Ж·с - Планк таклиф этган универсал доимийдир. Шунинг учун ўзида ν_0 частотали

тебранишлар бўлаётган атом $h\nu_0$ энергия захирасига эга бўлади. Бу энергияни атом ўшандай частотали ёруғлик тарзида чиқариши мумкин. Бу нуқтаи назардан ёруғликнинг молекулаларда сочилишини ёруғлик квантларининг (яъни фотонларнинг) молекулалар билан тўкнашиши деб қараш мумкин, бу тўкнашиш натижасида фотонлар учиш йўналишини ўзгартиради, яъни четга сочилади. Фотонлар билан молекулалар ўртасидаги тўкнашишлар эластик бўлиши ҳам, ноэластик бўлмаслиги ҳам мумкин. Тўкнашиш эластик тўкнашиш бўлган ҳолда молекуланинг энергияси ва фотоннинг ν_0 частотаси ўзгармайди, бу ҳол Релей сочилишига мос келади. Релейча сочилиш пайтида сочилган ёруғлик квантларининг частотаси муҳитга тушаётган ёруғлик квантларининг частоталарига мос келади. Шунинг учун ҳам Релейча сочилишга эластик сочилиш ҳам дейилади.

Тўкнашиш эластик бўлмаган ҳолда фотоннинг энергияси $h\nu_i$ тебранма квант миқдорида ортади ёки камаяди. Агар ёруғлик тебраниш ҳолатида бўлмаган молекула билан ўзаро таъсир қилишса, ёруғлик молекулага энергиясининг тегишли қисмини бериб, $h\nu' = h\nu_0 - h\nu_i$ ёки $\nu' = \nu_0 - \nu_i$ тенгламага мувофиқ равишда кичик частотали нурга (қизил йўлдош, Стокс чизиғига) айланади, бу ерда ν_0 уйғотувчи ёруғлик частотаси, ν_i молекула тебранишларининг частотаси.

Агар ёруғлик тебраниш ҳолатида турган молекулага, яъни $h\nu_i$ - энергияга эга бўлган молекулага таъсир қилса, у ҳолда ёруғлик молекуладан бу энергияни тортиб олиб, $h\nu' = h\nu_0 + h\nu_i$ ёки $\nu' = \nu_0 + \nu_i$ тенгламага мувофиқ равишда катта частотали нурга (бинафша йўлдош, антистокс чизиғига) айланади. Юқорида айтилганлардан келиб чиқиб комбинацион сочилишга қуйидагича таъриф бериш мумкин. Сочилган ёруғликнинг частотаси тушаётган ёруғликнинг частотаси ν_0 билан молекулалар ичида бўладиган тебранишлар частотасининг ν_i комбинациясидан таркиб топади. Шунинг учун бу сочилиш комбинацион сочилиш деб аталади (1.1-расм).



1.1 - расм. Уйғотувчи манбанинг (а) ва комбинацион сочилиш спектрининг (б) схематик кўриниши. (E_0, E_1, \dots энергетик ҳолатлар)

Тебраниш ҳолатида бўлган молекулалар сони уйғотилмаган молекулалар сонидан анча кам бўлади. Шунинг учун бинафша йўлдошнинг интенсивлиги қизил йўлдош интенсивлигидан беқиёс даражада кам бўлиши керак, тажрибада ҳам худди шундай бўлади. Температура кўтарилган сари уйғотилган молекулалар сони тез кўпаяди, шунга яраша бинафша йўлдошларнинг интенсивлиги тез ортиши керак, бу ҳам тажрибада тасдиқланмоқда. Стокс ва антистокс чизиқларининг интенсивлиги температурага боғлиқ. Мисол учун стокс чизиқларининг икки хил температурада интенсивликларининг қиймати қуйидаги нисбатда бўлади:

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

Стокс чизиқларининг интенсивлиги температурага тескари пропорционал бўларди. Антистокс чизиқлариники эса температурага тўғри пропорционал бўлади:

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

Стокс ва антистокс чизиқларининг интенсивликлари нисбати

$$\frac{I_{ac}}{I_c} \approx \left(\frac{\nu_0 + \nu_{me\delta}}{\nu_0 - \nu_{me\delta}}\right)^4$$

бундан кўринадики частотанинг тўртинчи даражасига пропорционал экан.

Ҳақиқатда, ν частотали комбинацион чизиқнинг интенсивлиги молекуланинг бу частотага мос келадиган тебранишлар қилишида молекуланинг α қутбланувчанлиги нақадар кўп ўзгариши билан аниқланади. Қутбланувчанликнинг ўзгариши билан электр моментининг ўзгариши турли хил тебранишларда турлича ифодаланиши мумкин. Баъзи тебранишлар инфрақизил спектрида актив бўлса, бошқаси комбинацион сочилиш спектрида актив бўлади [2].

Кўп ҳолларда бу усул инфрақизил ютилиш методи билан бирга қўшиб ўрганилиб, молекулани тўлиқ тадқиқ этиш имконини беради. Комбинацион сочилиш спектрлари молекулалар учун шунчалик характерлидирки, бу спектрлар ёрдамида мураккаб молекуляр аралашмаларни, айниқса химиявий йўл билан анализ қилиш қийин ёки хатто анализ қилиб бўлмайдиган органик молекулалар аралашмаларини анализ қилиш мумкин. Масалан: углеводородларнинг жуда мураккаб аралашмаси бўлган бензинларнинг

таркиби комбинацион сочилиш методи ёрдамида самарали равишда анализ қилинади. Ёруғликнинг комбинацион сочилиши ҳодисасини классик физика доирасида туриб тушунтириб бериш мумкин, лекин унинг квант талқини ёруғликни квант табиатини моҳиятан тасдиқлайди.

Молекулалар структурасини, ички молекулалар ва молекулалараро кучларини ўрганишда, мураккаб аралашмаларни таҳлил қилиш ва у ёки бу бирикмаларни индентификациялаш (ажратиш) да комбинацион сочилиш усули муҳим анжомдир.

1.3. Изотроп ва анизотроп муҳитлардан ёруғликнинг сочилиши

Бизга анизотроп молекулали газ берилган бўлсин. Бундан биз элементар ҳажмни ажратиб оламиз. Шу газга қутбланган ёруғлик тушаётган бўлсин. Қутбланган ёруғлик таъсирида молекулада ўзгарувчан дипол ҳосил бўлади [7].

$$P = P_0 \sin \omega t \quad (1.13)$$

бу ўзгарувчан дипол ўзидан электромагнит тўлқинларни тарқата бошлайди. Худди шундай элементар ҳажмдаги ҳамма диполлар иккиламчи тўлқинлар чиқара бошлайди ва бу тўлқинларнинг зичлик флуктуациясига боғлиқ бўлган қисми

$$\Delta E_i = \frac{\omega^2}{c^2 r} \alpha \sin \theta \Delta N \quad (1.14)$$

ΔN - молекулалар сонининг ўртача қийматидан оғиши

$$\Delta E_i = \frac{\omega^2}{c^2 r} \alpha \rho = \alpha E \sin \theta \Delta N \quad (1.15)$$

Шу (1.15) ни электр майдон кучланганлигининг флуктуациясини квадратга кўтариб ўртача қийматни олсак, у вақтда

$$\left(\overline{\Delta \sum_i R E_i} \right)^2 = I_0 \frac{\omega^4}{c^4 r^2} \alpha^2 \sin^2 \theta (\overline{\Delta N})^2 \quad (1.16)$$

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

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

$$\omega = 2\pi \frac{c}{\lambda} \quad \text{демак} \quad (\overline{\Delta N})^2 = \overline{N} = N_1 V$$

у вақтда $\Delta \overline{N} = \overline{N} - \overline{N} = 0$ ни қуйидагича ёзиш мумкин.

$$I = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V \sin^2 \theta \quad (1.17)$$

(1.17) ни ҳосил қиламиз.

Бу ифода элементар ҳажмдан зичлик флуктуацияси ҳисобига сочилган ёруғлик интенсивлигини беради. Умумий ҳажм учун ёзсак:

$$I = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V \sin^2 \theta \quad (1.18)$$

Бу Эйнштейннинг Релей формуласига эквалент бўлган формуласи.
(1.18) ифода агар табиий ёруғлик тушаётган бўлса

$$I = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 N_1 V (1 + \cos^2 \varphi) \quad (1.19)$$

Лорентц-Лоренц формуласидан $\alpha = \frac{n^2 - 1}{4\pi N_1}$ ёки $\alpha = \frac{n - 1}{2\pi N_1}$

$$I = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \frac{(n-1)}{N_1} V (1 + \cos^2 \varphi) \quad (1.20)$$

Бу ифода сийраклашган газларга табиий ёруғлик тушганда сочилган ёруғлик интенсивлигини характерловчи Эйнштейн формуласи.

Анизотроп молекулали газларда зичлик флуктуациясидан ташқари анизотропия флуктуацияси ҳам юз беради. Бу флуктуация ҳам ёруғликнинг сочилишига сабаб бўлади. Анизотроп молекулали газга қутбланган ёруғлик тушса унда ҳосил бўлган молекулаларнинг дипол моменти майдон билан устма-уст тушмайди ва ўзаро бир-бири билан турли бурчаклар ҳосил қилади. Натижада улардан чиқарилаётган электромагнит тўлқин кузатиш нуқтасига турли бурчаклар остида бориб етади.

X- ўқи бўйича қутбланган ёруғлик тушаётган бўлса ва унинг электр вектори Z-ўқи бўйича тебранаётган бўлса, унинг таъсирида ҳосил бўлган ўзининг дипол Z ўқидан бошқа бурчакка оғган бўлади, бошқа молекулалар бунга нисбатан бошқа бурчакларда қуйилган шунинг учун қутбланиш асбоби Никол призмаси ёрдамида ажратиб олиш мумкин. Бу ерда ҳам кузатиш нуқтасига диполдан келаётган иккиламчи тўлқин кучланганлигини шундай ёзиб олиш мумкин.

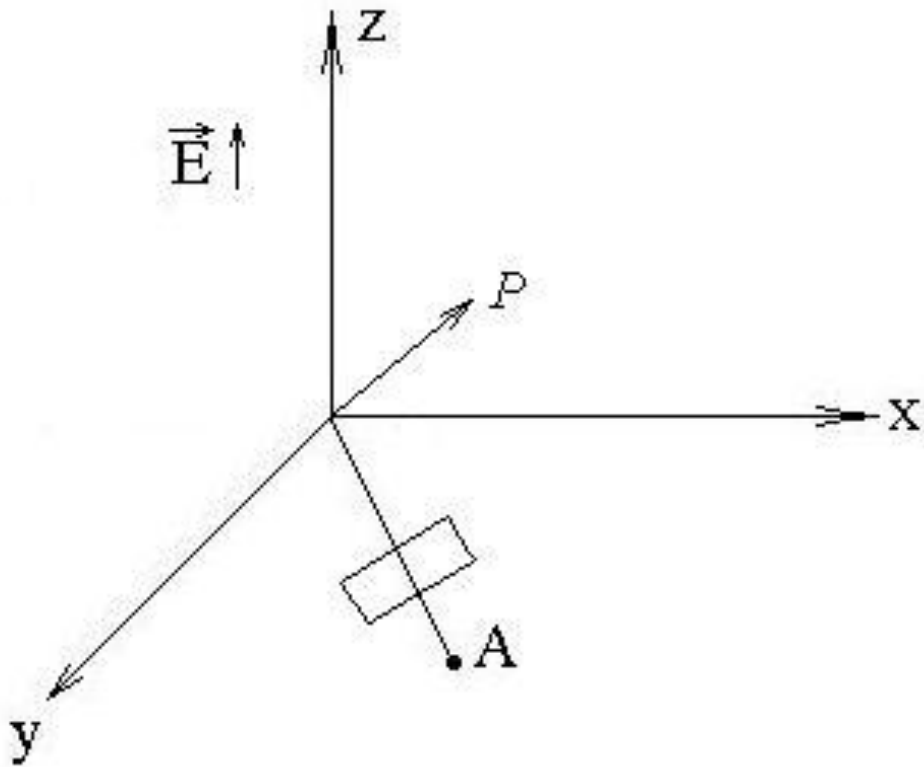
$$E^S = \frac{\omega^2}{c^2 r} \rho \sin \theta \quad (1.21)$$

Лекин бошқа молекулаларнинг чиқарган тўлқинларининг кучланганлиги турли бурчаклар ҳосил қилгани учун, кузатиш нуқтасига келувчи нурлардан кераклисини Никол призмаси ёрдамида ажратиб олиб, сочилишнинг текислигига перпендикуляр ёки параллел қутбланган нурларни кузатса бўлади. Шу поляризатордан ўтган ёруғликнинг тебраниш вектори билан мос бўлган \vec{q} бирлик векторини оламиз. Айнан шу векторга параллел бўлган электр вектор кучланганлигини олиш учун \vec{E} нинг \vec{q} га проекциясини олиш керак.

Бу проекциянинг катталигини топиш учун E нинг q билан скаляр кўпайтмасини олиш керак. Худди шундай операциялар бажариб анизотроп молекулали газлардан сочилган ёруғликнинг умумий интенсивлигини куйидаги формула билан ифодалаш мумкин.

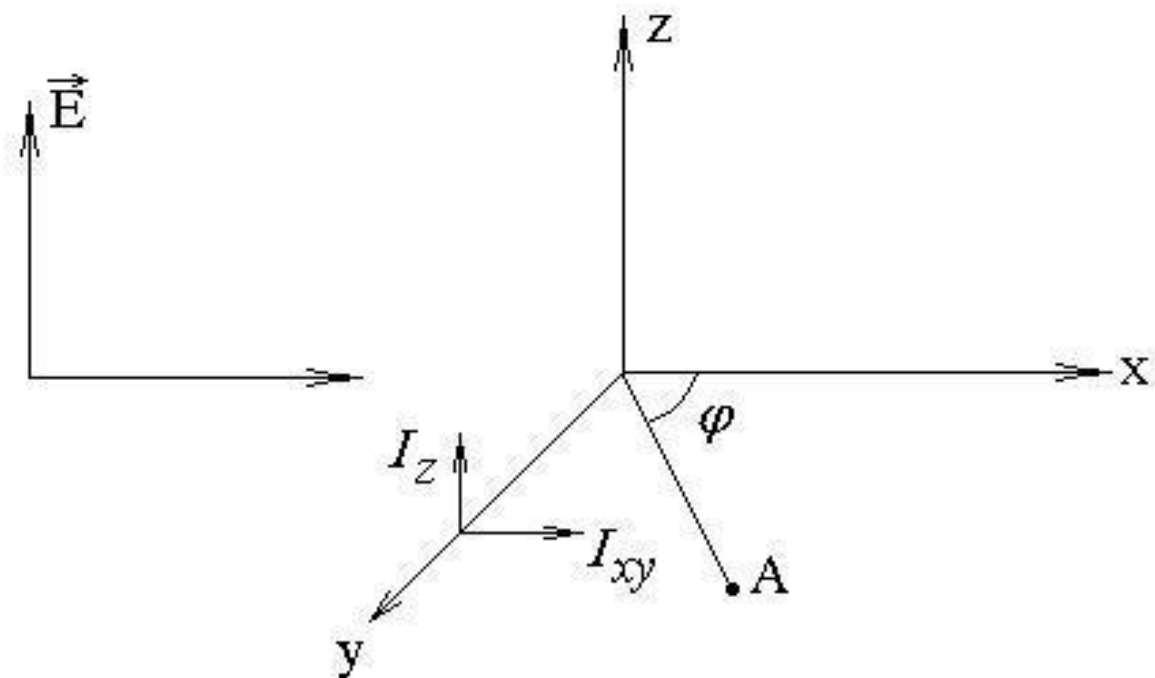
$$I_q = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 \cos^2 \theta + \frac{2}{30} \gamma^2 + \frac{2}{90} \gamma^2 \cos^2 \theta \right) \quad (1.22)$$

Бу ифодадаги интенсивликнинг биринчи ҳади зичлик флуктуацияси туфайли сочилган ёруғликнинг интенсивлигини беради. (1.21), (1.22) ҳади анизотропия ҳисобидан сочилган ёруғликнинг интенсивлигини беради. Худди шундай (1.21) ифодадан фойдаланиб табиий ёруғлик тушаётганда сочилган ёруғлик интенсивлигини ҳисоблаб топиш мумкин.



1.2-расм. Сочилган ёруғликнинг интенсивлиги

Табиий ёруғлик X-ўқи бўйича тушяпти деб фараз қиламиз
1.2-расмга қаранг.



1.3-расм. Сочилган ёруғлик интенсивлигини координата ўқларидаги ҳаракати

Бундай ҳолда сочилган ёруғлик интенсивлигини топиш учун уни икки текисликда қутбланган ёруғликдан иборат деб қараймиз. Бири Z-ўқи бўйича, иккинчиси Y-ўқи бўйича тебранияпти [8]. Ўтган дарсда айтганимиздек поляризатор ёрдамида X Y- текислигида тебранияётган нурни ажратиб оламиз бу нурни биз параллел нур деб $I_{\parallel} = I_{xy}$ оламиз. Z- ўқи бўйича тебранияшни $I_{\perp} = I_z$ деб белгилаймиз (1.3-расм).

$$I_{\perp} = I_z = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{6}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \right) \quad (1.23)$$

параллел ташкил этувчиси эса

$$I_{\parallel} = I_{xy} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 \cos \varphi + \frac{6}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \cos^2 \varphi \right) \quad (1.24)$$

умумий интенсивлик $I = I_{\parallel} + I_{\perp}$ ни топиш учун (1.23) билан (1.24) қўшамиз.

$$I = I_{\parallel} + I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left[\alpha^2 (1 + \cos^2 \varphi) + \frac{13}{45} j^2 + \frac{1}{45} j^2 \cos^2 \varphi \right] \quad (1.25)$$

(1.25) чи анизотроп молекулали газларга табиий ёруғлик тушганда сочилган ёруғлик интенсивлигини беради. Агар кузатиш тушувчи ёруғликка нисбатан 90^0 бурчак остида бажарилаётган бўлса $\varphi = 90^0$, $\cos \varphi = 0$ бўлади у ҳолда I_{\parallel} ва I_{\perp} ташкил этувчилар

$$I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{7}{45} j^2 \right) \quad (1.26)$$

$$I_{\parallel} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \frac{6}{45} j^2 \quad (1.27)$$

(1.26) чи ва (1.27) ифодалардан кўринадики анизотроп газларга табиий нур тушаётганда 90^0 бурчак остида сочилган ёруғлик тўлқин қутбланмаган балки қисман қутбланган бўлар экан. Бу нурнинг қутбсизланиш даражаси $\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}}$

бунга (1.26) билан (1.27) чини қўйсак

$$\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = \frac{\frac{6}{45} j^2}{\alpha^2 + \frac{7}{45} j^2} \quad (1.28)$$

Бу ифода сочилган ёруғликнинг қутбланиш даражаси, молекуланинг қутбланувчанлиги, ҳамда оптик анизотропия орасидаги боғланишни беради. (1.26) билан (1.27) нинг йиғиндиси табиий ёруғлик тушаётган 90^0 бурчак остида сочилган ёруғлик интенсивлигини беради.

$$I_{90^0} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} N_1 V \left(\alpha^2 + \frac{13}{45} j^2 \right) \quad (1.29)$$

Биринчи қисми зичлик флуктуацияси ҳисобидан иккинчи қисми анизотропия флуктуацияси ҳисобидан сочилишини беради. $\alpha = \frac{n-1}{2\pi N_1}$

лигини ва $j^2 = 45\alpha^2 \frac{\Delta}{6-7\Delta}$ лигини ҳисобга олсак (1.29) ни қуйидагича ёзиш

мумкин.

$$I = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n-1}{N_1} \right)^2 V \left[(1 + \cos^2 \varphi) + \frac{45\Delta}{6-7\Delta} \cdot \left(\frac{13}{45} - \frac{1}{45} \cos^2 \varphi \right) \right] \quad (1.30)$$

Агар $\varphi = 90^0$ десак, у вақтда

$$I_{90^0} = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \frac{(n-1)^2}{N_1} V \frac{6+6\Delta}{6-7\Delta} \quad (1.31)$$

$\frac{6+6\Delta}{6-7\Delta}$ ни биринчи бўлиб француз олими Кабан аниқлаган, шунинг учун ҳам

Кабан фактори деб юритилади

1.4. Молекулалараро ўзаро таъсир спектроскопияси

Моддаларнинг қаттиқ жисм ҳолатига ўтиш имконияти, ташкил этувчи заррачаларнинг бир-бирига кичик масофага яқинлашишида, улар орасида ҳосил бўладиган боғланиш кучларига боғлиқдир. Бундай заррачалар, одатда атом, ион ва молекулалардан иборатдир.

Қаттиқ жисмнинг мустақкам панжаравий тизими ҳосил бўлиши учун заррачалар орасида икки хил куч таъсир этиши мумкин:

- заррачаларнинг бир-биридан узоқлашишига тўсқинлик қилувчи тортишиш кучлари;
- заррачаларнинг бир-бирига қўшилишига қаршилик қилувчи итариш кучлари.

Ушбу кучларнинг табиатини қисқача кўриб чиқамиз.

Исталган атом ва молекулалар орасида пайдо бўлувчи умумийроқ кўринишда бўлган боғланиш кучлари - Ван-дер-Ваальс кучларидир. Бу кучлар биринчи бўлиб қаттиқ фаза ҳолатида бўлган реал газлар ҳолат тенгламасига киритилган эди.

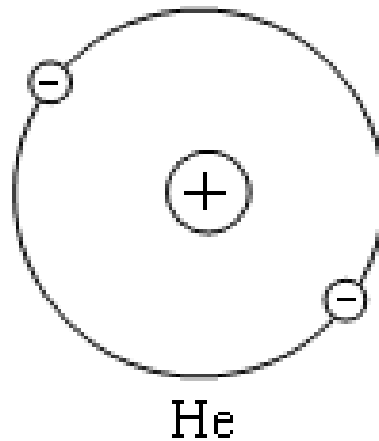
$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT \quad (1.32)$$

бу ерда $\frac{a}{V_m^2}$ ва b – қўшимча ҳадлар, қаттиқ ҳолатдаги реал газ молекулалари орасидаги тортишиш ва итариш кучларини ҳисобга олиш учун киритилган, b – молекулаларнинг ўзи эгаллаган ҳажми, a – молекулалар орасидаги тортишиш кучи.

Аниқ кўринишда бу кучлар тўлиқ химиявий боғланишга эга бўлган куйидаги молекулалар орасида пайдо бўлади: - O_2 , H_2 , N_2 , CH_4 ва бошқалар.

Суюқ ва қаттиқ ҳолатларда бўлган инерт газлар атомлари орасида ҳам кузатилади. Умумий ҳолда Ван-дер-Ваальс кучлари ўзига дисперсиявий, ориентациявий ва индукциявий таъсир кучларини қамраб олади.

Дисперсияли таъсир кучлар. Оддий мисол тариқасида иккита гелий атоми орасидаги таъсирни кўриб чиқамиз. Гелий атомининг электрон зичлиги тақсимланиши, унинг электр моментининг ўртача қиймати нолга тенг бўлганлиги учун, сферик симметрияга эга бўлади (1.4 - расм).

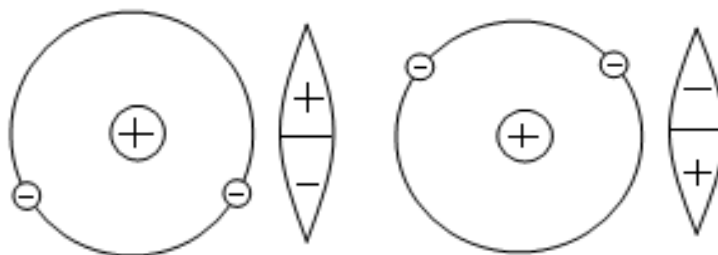


1.4– расм. Гелий атоми электрон зичлигининг тақсимланиши

Вақтнинг айрим онларида электронлар фазонинг маълум нуқталарида жойлашиб, бирдан тез ўзгариб турадиган электр диполлари ҳосил қиладилар.

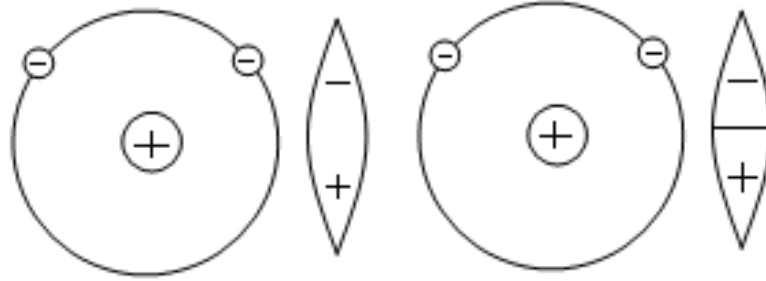
Иккита гелий атоми яқинлаштирилганда бу атомлар электронлари ҳаракатида («корреляция») мувофиқлик ўрнатилади, натижада атомлар ўртасида ўзаро таъсир кучлари ҳосил бўлади. Бундай кучлар икки хил характерга эга бўладилар:

- агарда электронлар атомларнинг бир томонларига тўпланиши мувофиқланса (1.5 - расм) тортишиш кучлари ҳосил бўлади;



1.5 – расм. Гелий атомларида тортишиш кучларини ҳосил бўлиши

- агарда электронлар атомларнинг тескари томонларига тўпланиши мувофиқлашса итариш кучлари пайдо бўлади (1.6 - расм).



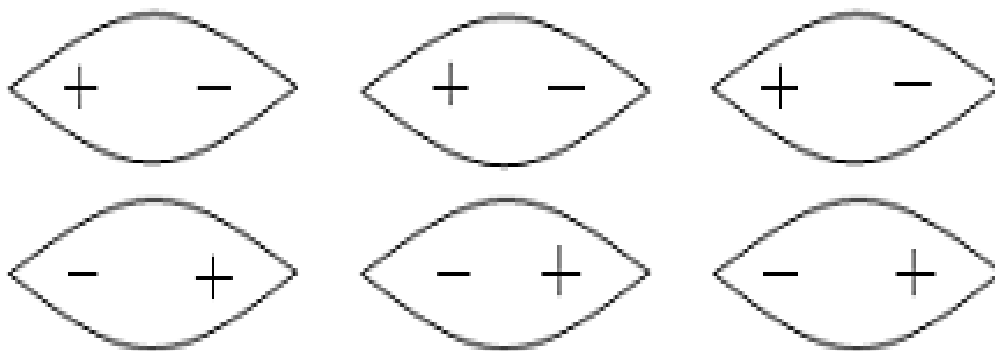
1.6– расм. Гелий атомларида итариш кучларини ҳосил бўлиши

Электронларнинг мувофиқлашган ҳаракати натижасида пайдо бўладиган боғланиш кучлари **дисперсияли кучлар** деб аталади ва қуйидагича ифодаланади:

$$U_{\partial} = -\frac{3 \alpha^2 I}{4 r^6} \quad (1.33)$$

бу ерда α - заррачанинг кутбланиши, I - заррачаларнинг қўзғотилиш энергияси, r - диполлар орасидаги масофа.

Ориентациявий таъсир кучлар. Агар молекулалар доимий M – диполь моментига эга бўлсалар, яъни кутбли бўлсалар, у ҳолда улар орасида электростатик таъсир кучлари пайдо бўлади, натижада тизимнинг энергияси камайишига боғлиқ равишда молекулалар қатъий тартибда жойлашишга интиладилар (1.7 - расм).



1.7 – расм. Қутбли молекулаларда электростатик кучларни ҳосил бўлиши

Молекулаларнинг тўғри «ориентацияси» - иссиқлик ҳаракатида бузила бошлайди ва кучли равишда температурага боғлиқ бўлади. Паст температураларда молекулалар тартибли йўналишга тўлиқ эга бўлсалар, ўзаро таъсир энергияси қуйидаги нисбат билан аниқланади:

$$U_{op} = -\frac{M^2}{2\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.34)$$

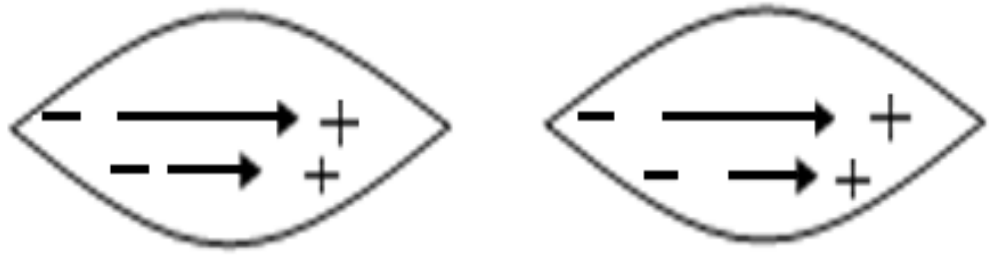
Юқори температураларда эса:

$$U_{op} = -\frac{M^2}{24\pi^2\epsilon_0^2 r^3} \frac{1}{r^6} \quad (1.35)$$

Бу турдаги ўзаро таъсирлар **ориентациявий таъсирлар** деб аталади.

Индукцияли таъсир кучлари. Кучли қутбланишга эга бўлган қутбли молекулаларда қўшни молекуланинг доимий диполи майдони таъсирида қўшимча момент ҳосил бўлиши мумкин (1.5 - расм).

Биринчи молекуланинг доимий диполи ва иккинчи молекуланинг индукцияланган диполи орасидаги ўзаро таъсири натижасида вужудга келадиган ўзаро тортишиш энергияси қуйидаги нисбат билан аниқланади:



1.8– расм. Кучли кутбланишга эга бўлган молекулаларда қўшимча момент ҳосил бўлиши

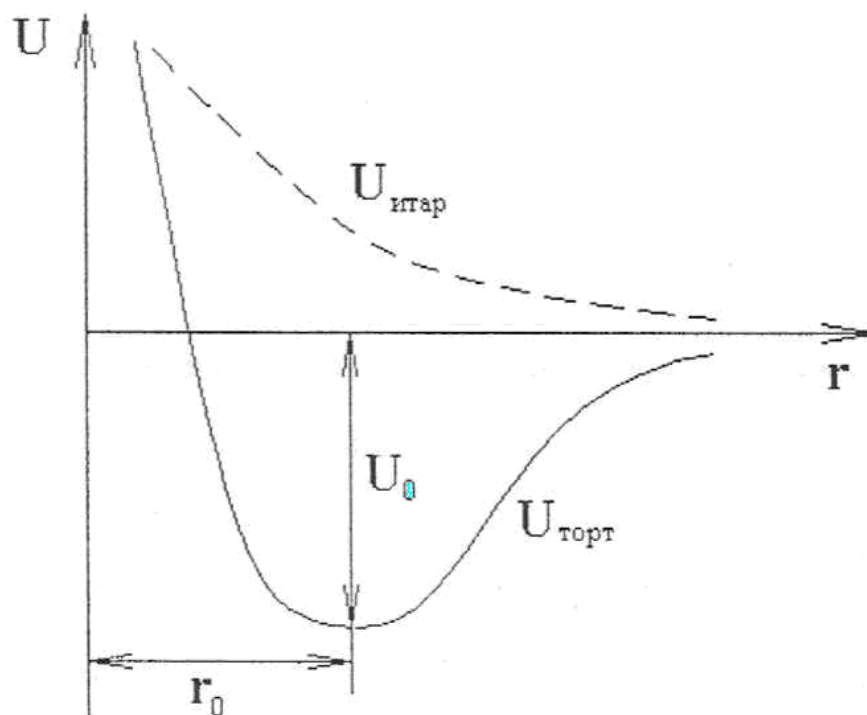
$$U_{\text{инд}} = -\frac{\alpha\mu^2}{\gamma\pi\epsilon_0^2} \frac{1}{r^6} \quad (1.36)$$

Бундай ўзаро таъсир **индукциявий** ёки **деформацияли** таъсир деб аталади. Умумий ҳолда, иккита молекула яқинлашишида, учта кўринишдаги ўзаро таъсирлар пайдо бўлади ва натижавий таъсир кучлари учта таъсир энергияларининг йиғиндисига тенг бўлади [9].

Атом ва молекулаларни яқинлаштиришда, юқорида келтирилган боғланиш кучларининг табиатига қарамай, улар орасида бир хил умумий характерга эга бўлган таъсир сақланади:

- нисбатан катта масофаларда тортишиш кучлари (F_m) пайдо бўлиб, заррачалар орасидаги масофа қисқариши билан тез оша бошлайди (1.9 – расм).

- нисбатан кичик масофаларда итариш кучи (F_u) пайдо бўлиб, r масофа қисқариши билан тортишиш кучига нисбатан янада тезроқ оша бошлайди (1.9 – расм).



1.9 – расм. Атомлар орасидаги боғланиш кучлари

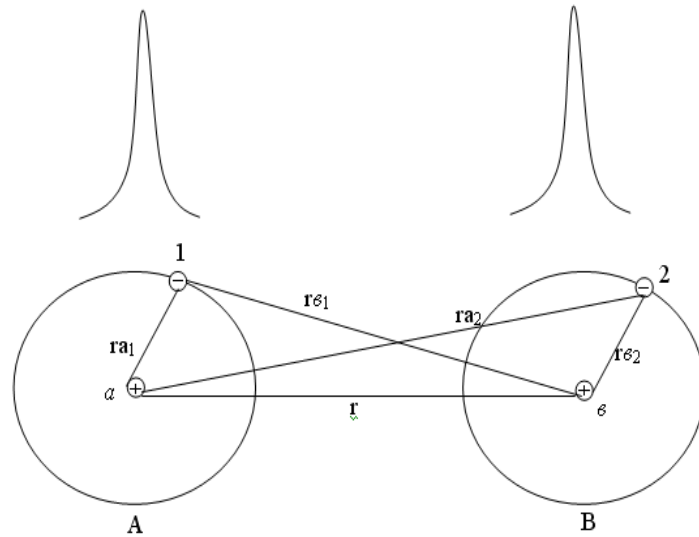
Маълум бир $r = r_0$ масофада итариш кучлари тортишиш кучлари билан тенглашади ва натижада натижавий ўзаро таъсир кучи F нолга айланади, ўзаро таъсир энергияси U_c минимал қийматга эришади (1.9 - расм). Шу сабабли, r_0 масофага яқинлашган заррачалар ҳолати мустаҳкам мувозанатдаги ҳолатга айланади [10].

1.5. Н-боғланишни комбинацион сочилиши спектрида текшириш

Ҳар бир атом ёки молекула ажойиб тузилишга эга, шу сабабли уларнинг ҳар бирига мос ажойиб спектр ҳам мавжуд. Атом, молекула бирикишидан ҳосил бўлган макросистемалар уларнинг энергик сатҳлари билан аниқланади. Квант механикасига кўра ҳар бир энергетик сатҳга мос келувчи аниқ квант ҳолат мавжуд. Бу ҳолатларда электрон ва ядро характерли даврий ҳаракатланади. Бу ҳаракатларда энергия, ҳаракат сонининг орбитал моменти ва бошқа физик катталиклар қабтий аниқ ва квантланган бўлиб, фақат рухсат этилган бутун ёки ярим квант сонига тенг дескрет қийматларни олади. Агар электрон ёки ядрони боғловчи куч миқдори бир хил бирликлар системасида берилган бўлса, квант механикаси қонунларига кўра энергетик сатҳини ва квант сонини ҳисоблаш мумкин. Шунингдек спектрал чизикларнинг интенсивлиги ва частотасини аниқлаш мумкин. Иккинчи томондан спектрини таҳлил қилиш орқали аниқ системанинг энергияси ва квант сонини, шунингдек унга таъсир этувчи куч ҳақида хулоса қилиш мумкин. Шундай қилиб спектроскопия атом ва молекулалар тузилиши ва кванто-кимёвий катталиклари ҳақида маълумотлар берувчи асосий манбадир.

Ионли ва Ван-дер-вальс боғланишлари орқали H_2 , O_2 , N_2 каби молекулалар бирикмалари ҳосил бўлишини, ҳамда олмос ва ярим ўтказгич кристалларидаги боғланишларни тушунтириш мумкин эмас. Бир жинсли атомлар валент электронларини қайта тақсимлаш орқали қарама-қарши зарядли ионларни ҳосил қилиш мумкин эмас. Бошқа тарафдан O_2 , H_2 , N_2 молекулаларидаги мустаҳкам боғланиш Ван-дер-вальс кучларидан жуда сезиларли каттадир. Бундай мустаҳкам боғланиш **ковалент боғланиш** деб аталади.

Водород молекуласи мисолида бу боғланиш табиатини кўриб чиқамиз (1.10 - расм).



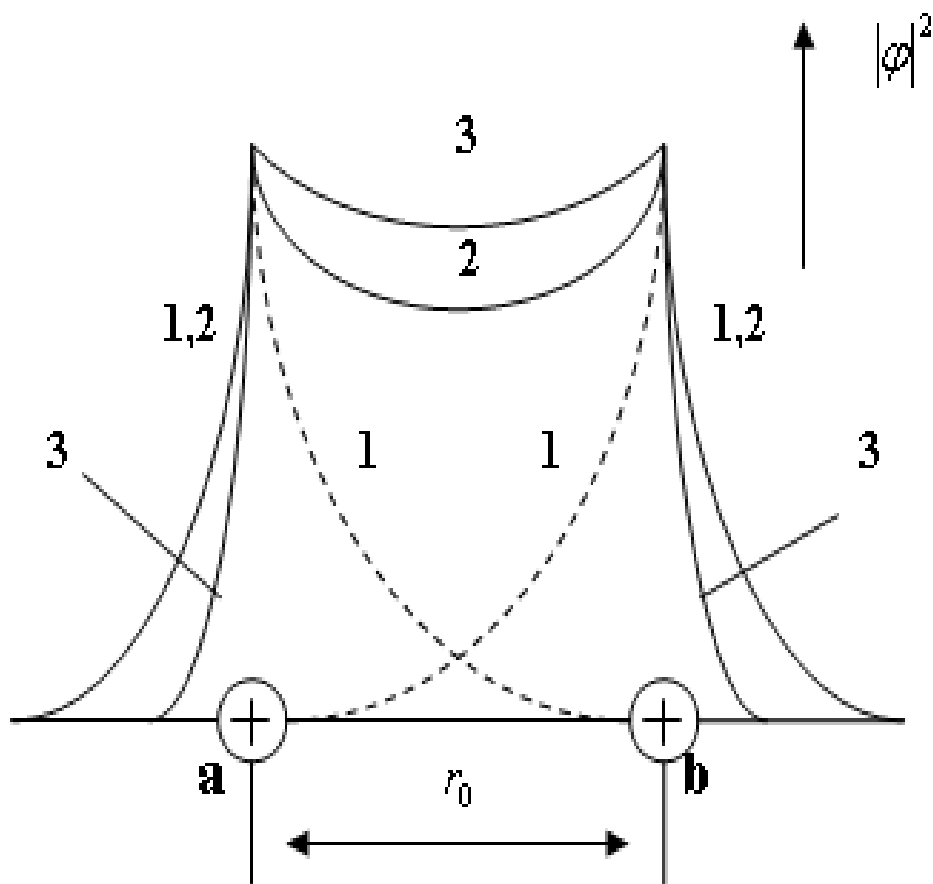
1.10 – расм. Катта масофада жойлашган водород электронлари ҳолатлари

Масалан, ядроси a ва электрони 1 бўлган A атом ва ядроси b , электрони 2 бўлган B атом бир-биридан r – катта масофада жойлашган деб ҳисоблаймиз.

Атом атрофидаги электрон ҳолатини ифодаловчи электрон булутини зичлиги ($S = 4\pi r^2 \psi \psi^*$) масофага боғлиқ тез сўниши сабабли b ядро атрофида 1-электронни, a ядро атрофида 2-электронни бўлиш эҳтимоли жуда кичикдир. Шу сабабли A ва B атомларни бир-бири билан таъсирлашмайдиган алоҳида атомлар деб ҳисоблаш мумкин ва икки атомдан ташкил топган тизим энергияси $2E_0$ га тенг деб ҳисоблаймиз. Бу ерда E_0 – одатдаги шароитдаги алоҳида атомнинг энергиясидир.

Атомларнинг яқинлашиши билан бегона атомларга электронларнинг ўтиш эҳтимоли ошади.

Атомлар орасидаги масофа $r \approx 2A^0$ га етганда бу атомларнинг электрон булутлари бир-бирини тўса бошлайди. Атомларнинг кейинги яқинлашишида булутларнинг тўсиш даражаси орта боради ва электронларнинг алмашиш частотаси шу даражада ошаборадик, 1 - электронни A - атомга, 2 -электронни B - атомга тегишли эканлиги ўз кучини йўқотади (1.11 - расм).



1.11 – расм. Қисқа масофаларда водород атомлари электрон булутларини бир - бирини тўсиши

Шундай қилиб, бу ҳолатда электронлар бир вақтда иккала ядрога тегишли бўлади ва улар **умумлашган** ҳисобланади [11].

Электронларнинг умумлашиши электронлар зичлигини $|\psi|^2$ қайта тақсимланишига ва тизим энергиясини алоҳида атомларнинг энергиялари йиғиндисига $2E_0$ нисбатан ўзгаришига олиб келади. 1.11 расмда 1 - пунктир чизиқлар билан алоҳида атомларнинг электрон булутлари зичлиги тасвирланган; 2 - узлуксиз чизиқлар билан алоҳида атомлар электрон булутларини оддий йиғиндиси тасвирланган; 3 - қалин чизиқлар $a - b$ ядролар учун умумлашган электронлар ҳосил бўлгандаги электронлар булути зичлигини тақсимланиши тасвирланган.

1 - ва 2 - ҳолатларга қараганда 3 - ҳолатда иккала ядролар ўртасидаги электронлар зичлиги ошаборади. Ядролар орасидаги фазода электрон булутлар зичлигининг ошиши тизим энергиясининг камайишига ва атомлар

орасида тортишиш кучларини вужудга келтиради. Ана шу **ковалент боғланишни** ҳосил бўлишдир.

Водород молекуласининг энергияси

$$U_s = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2}$$

га тенг. Бу ерда $2E_0$ – иккита водород атоми энергиялари йиғиндисидир; K - электронларнинг ядро билан, электронларнинг ўзаро ва ядроларнинг ўзаро электростатик таъсир энергиясидир. Бу энергия манфийдир ва уни **Кулон** энергияси деб аташади. A – атомларнинг ўзаро электронлар билан алмашиш энергиясидир ва у доимо K дан катта бўлади $|A| > |K|$. $S < 1$, K ва A манфий бўлганлиги учун тизим энергияси камайиб боради:

$$U_s = 2E_0 \quad (1.37)$$

Ҳар бир водород атоми ўзининг битта қўшни атоми билан боғланиш ҳосил қилиш мумкин. Бу боғланишни ташкил этувчи иккита электрон қарама-қарши спинларга эга ва битта квант ячейкани эгаллайди. Учинчи атом, бу шароитда, тортишмасдан итарилади.

Кремний, германий кристалларида элементар катакчадаги атом валент боғланишни тўртта яқин қўшни атомлар билан ҳосил қилади. Шу тўртта ковалент боғланишларни ҳосил қилувчи ҳар икки электрон қарама-қарши спинларга эга бўлади.

Суюқликлар структураси ва молекулалар динамикасини ўрганиш усуллари орасида ёруғликни сочилиши орқали ўрганиш усули энг асосий ўринни эгаллайди. Бу бир тарафдан сочилиш спектри орқали кўп маълумотларга эга бўлиш билан боғлиқ бўлса иккинчи тарафдан бундай экспериментларнинг оддийлиги ва арзонлиги билан ҳам боғлиқ.

Молекулалардан ёруғликнинг сочилишини икки ҳоли мавжуд.

- Эластик - бу молекуланинг ички ҳолати ўзгармаганда содир бўлади, яъни муҳитдан сочилган ёруғлик частотаси билан муҳитга тушадиган ёруғлик частотаси мос тушади.

- Ноэластик - молекула ички ион энергетик ҳолатда бўлади. Муҳитдан сочилган нурланиш частотаси муҳитга тушадиган ёруғлик частотасидан фарқ қилади.

Биринчи ҳол Релей сочилиши деб (РС), иккинчи ҳол эса комбинацион сочилиш (КС) (жаҳон адабиётларида Раман эффекти) деб ном олди.

Релей сочилишида сочилган ёруғлик билан тушувчи ёруғлик когерент, шунинг учун ҳам бу жараён орқали молекулалар ҳаракати ва муҳит структурасини яхши ўрганиш мумкин. Молекулалар индивидуал ва коллектив ҳаракати ҳақидаги маълумот сочилган ёруғлик спектрал чизиғида интенсивликни тақсимланишини ўрганиш орқали олинади.

Комбинацион сочилиш некогерент (молекулалар тебранишидан ҳосил бўладиган тебранишларнинг когерент эмаслигидан) шунинг учун ҳам бу сочилишда индивидуал зарра ҳаракати ҳақида маълумот мавжуд бўлади. Лекин бу спектрлар орқали ички молекуляр релаксацион жараёнлар характерини билиш мумкин.

Масалани қўйилишига қараб муаммони ечиш усули танланади. Чунки қараладиган ҳодисани математик аппарат тўла ёритиши лозим. Масалан, суюқликларда тебраниш спектрлари формасини аниқлашда квант назариясидан фойдаланиш аниқ ечимга олиб келади.

Раман эффекти модданинг молекуляр тузилишини тадқиқ этишнинг муҳим усули ҳисобланади. Молекула тебранишларининг хусусий частоталари молекула симметриясининг характери, молекулалар ичида таъсир қиладиган кучларнинг катталиги ва умуман молекуляр динамиканинг ўзига хос томонлари тўғрисида фикр юритишга имкон беради.

Кўп ҳолларда бу усул инфракизил ютилиш спектри билан бирга ўрганилиб, молекулани тўлиқ тадқиқ этиш имконини беради.

Бу спектрлар ёрдамида мураккаб молекуляр аралашмаларни, айниқса кимёвий йўл билан анализ қилиш қийин, ҳатто анализ қилиб бўлмайдиган органик молекуляр аралашмаларни анализ қилиш мумкин. Масалан:

углеводородларнинг жуда мураккаб аралашмаси бўлган бензинларнинг таркиби комбинацион сочилиш усули ёрдамида самарали анализ қилинади.

Маълумки кимёвий элементларнинг атомлари ўзаро бирикиб, жуда кўп оддий ва мураккаб моддаларнинг молекулаларини ҳосил қилади. Бундай молекулаларда атомлар бир-бири билан қандай куч ҳисобига боғланиб туради деган савол туғилади. Нормал шароитда инерт газ (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) ларнинг атомлари эркин ҳолда мавжуд бўла олади, бошқа ҳар қандай элемент атомлари эркин ҳолда узоқ вақт мавжуд бўла олмайди. Улар бир-бири билан бирикишга ҳаракат қилади, натижада эса оддий ёки мураккаб моддаларни ҳосил қилади. Ҳар қандай кимёвий элемент ўзининг ташқи энергетик сатҳда электронлар сонини тугалланган ҳолатга етказишга интилишини кимё фанидан яхши биламиз. Инерт газларнинг ташқи энергетик сатҳида эса электронлар сони тугалланган бўлади.

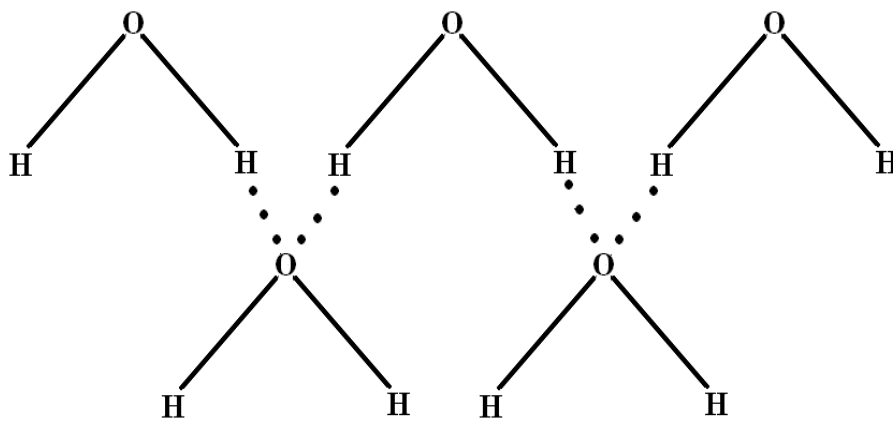
Ҳар бир элемент ўзининг ташқи энергетик сатҳдаги электронларининг ядрога боғланиш энергияси билан фарқланади. Н-боғланишда электроманфийлик тушунчаси муҳим ўрин тутади. Масалан, фтор Ф атомининг ташқи электрон сатҳида етита электрон бор, кимёвий реакцияларда электрон қабул қилиб олиб ташқи электрон сатҳдаги электронларни саккизтага етказиб, тўлдириб олади.

Айни элемент атомининг бошқа элемент атомидан электронларни тортиб олиш хусусияти электроманфийлик дейилади. Электроманфийлиги энг юқори бўлган элемент фтордир, цезийники энг кичикдир. Водород боғланиш кимёвий боғланиш турига кириб ички молекуляр ва молекулалараро боғланиш бўлиши мумкин [12].

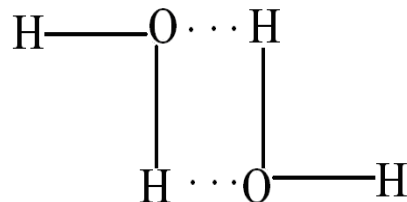
XIX асрнинг охирларида М.А.Ильинский кислород ёки азот билан бириккан водород бошқа атом билан ҳам бирика олишини, яъни водородда асосий валентликдан ташқари, қўшимча валентлик ҳам борлигини айтиб, бу ҳодисани назарий жиҳатдан асослаган эди. Водород боғланиш орқали икки атом ёки икки молекула бир-бири билан боғланиши мумкин. Водород боғланиш ҳосил бўлиш механизмини Н.Д.Соколов квант механика назарияси

асосида изохлаб берган. Водород электроманфийлиги юқори бўлган элементлар: F, Cl, O, N билан бирикканда водород боғланиш ҳосил бўлади. Водород боғланиш кучсиз, унинг энергияси $5\div 7$ ккал/мол атрофида бўлади ва водород боғланишни модданинг барча агрегат ҳолатларида учратиш мумкин.

Мисол тариқасида суяқ ҳолатдаги сувни қараш мумкин. Сувни ҳар бир молекуласидаги водород атоми иккинчи молекуладаги кислород атоми билан қўшимча боғланган:



Бунинг натижасида сув молекулалари бир-бири билан боғланиб, йирикроқ заррачаларни ҳосил қилади. Уларни $(\text{H}_2\text{O})_n$ формула билан кўрсатиш мумкин ($n = 2, 3, 4 \dots$). Бу заррачалар ичида энг барқарори $(\text{H}_2\text{O})_2$ дир. $(\text{H}_2\text{O})_2$ нинг “структура” формуласи қуйидагича ёзилса бўлади.



Суяқликларда кўп тарқалган ассоциация бирикиб, йирикроқ заррача ҳосил қилиш ҳодисасининг сабаби водород боғланишдир дейиш мумкин.

Водород боғланишнинг келиб чиқиши водород атомининг табиатига боғлиқдир. Водород атоми ўзининг бир электронини йўқотганда водород

атоми ядросига айланади. Водород ионининг электрон кавати бўлмагани учун бошқа ионларнинг электронлари унинг яқинлашишига қаршилик қилмайди. Шу сабабли водород иони бошқа атомларнинг электрон каватига яқинлашади ва ичига кира олади. Н- боғланиш юқорида айтганимиздек унча мустаҳкам эмас. Кимёвий боғланиш мустаҳкамлиги шу боғланишни томомила узиш учун керак бўладиган энергия билан ўлчанади. Бу энергия боғланиш энергияси номи билан юритилади.

I.боб бўйича хулоса

I-бобда мавзуга оид назарий қарашлар бўйича илмий адабиётлар ўрганилди. Асосан электромагнит нурланишларни суяқ муҳитлардан ноэластик сочилишини ва молекуляр сочилишини физик асосларига батафсил тўхталинди. Зичлик флуктуацияси ва А.Эйнштейн назарияси, муҳитлардан ёруғликнинг комбинацион сочилишини назарий асослари ўрганилди.

Ҳозирги вақтгача ҳам муҳитлардан ёруғликни сочилишини тўла тушунтира оладиган назариялар йўқлиги экспериментал тадқиқотларнинг янада зарур эканлигини кўрсатмоқда.

Молекулалараро ўзаро таъсир ва водород боғланиш табиати ўрганилди.

Мавжуд назариялар муҳитни айрим хоссаларини ҳисобга олади холос. Шунинг учун молекулалараро ўзаро таъсир табиатини мукамал тушуниш учун кўпроқ экспериментал тадқиқотлар назарий ҳисоблашлар билан биргаликда олиб бориш зарурлиги кўринмоқда. Шунинг учун ҳам ушбу тадқиқот ишида тажриба натижалари назарий ҳисоблашлар билан солиштирилиб ўрганилди.

2.1. ДФС-52 спектрометрнинг оптик тузилиши ва ишлаш усули

Комбинацион сочилиш спектроскопияси дунёнинг бир қанча физик, физик-кимёвий ва биологик лабораторияларида модданинг кимёвий хоссаларини ва тузилишини моддага тегишмасдан текшириш усуллари ёрдамида аниқлаш учун фойдаланилади. Спектрометрларнинг иш принципи лазер нурларининг моддадан сочилишида юзага келган ёруғликнинг комбинацион сочилиш эффектига асосланган. Сочилган ёруғликда қўшимча частоталар ҳосил бўлади, бу частоталарни модда таркибидаги молекулаларнинг тебранишлари билан аниқлаш мумкин. Олинган спектрни таҳлил қилиш натижасида сочилган модда молекулаларнинг тебранишлари хусусий частоталарини аниқлаш имконини беради. Бу эса ўз навбатида модда тузилиши ва модданинг кимёвий таркиби ҳақида маълумотлар олиш имкониятини беради. Олинаётган спектрнинг сифати ва спектрдан олинadиган маълумотларнинг ишончилиги биринчи навбатда тажриба ўтказилаётган спектрометр аппаратларининг имкониятига тўғридан-тўғри боғлиқ бўлади. Спектрометрнинг асосий характеристикаларидан бири уйғотиш чизиғи босими ва спектрал ажрата олиш қобилияти ҳисобланади. Бу характеристикаларни яхшилашнинг бирдан бир йўли уйғотиш чизиғи босимини аниқлашда қисқа полосали интерференцион филтрлар билан юқори ажрата олиш қобилиятига эга спектрографлар комбинациясидан фойдаланишдир. Битта уйғотиш манбаи билан ишлайдиган спектрометрда қуйичастотали тебранма ўтишлари қайд қилишда Релей чизиғи эффективлиги етарли бўлмайди [13]. Икки нурли оптик схемаларда эса манбадан чиққан оқим иккита дастага ажралади-асосий ва қиёслаш дасталарига (рефератли). Асосан “оптик нолли” икки нурли схема кўп ишлатилади. Бу схемада тескари боғланиш алоқасини автоматик бошқариш тизими мавжуд. Монохраматорнинг кириш тирқишига модулятор орқали узлуксиз узатилаётган, фотометрга келиб тушаётган икки дастанинг

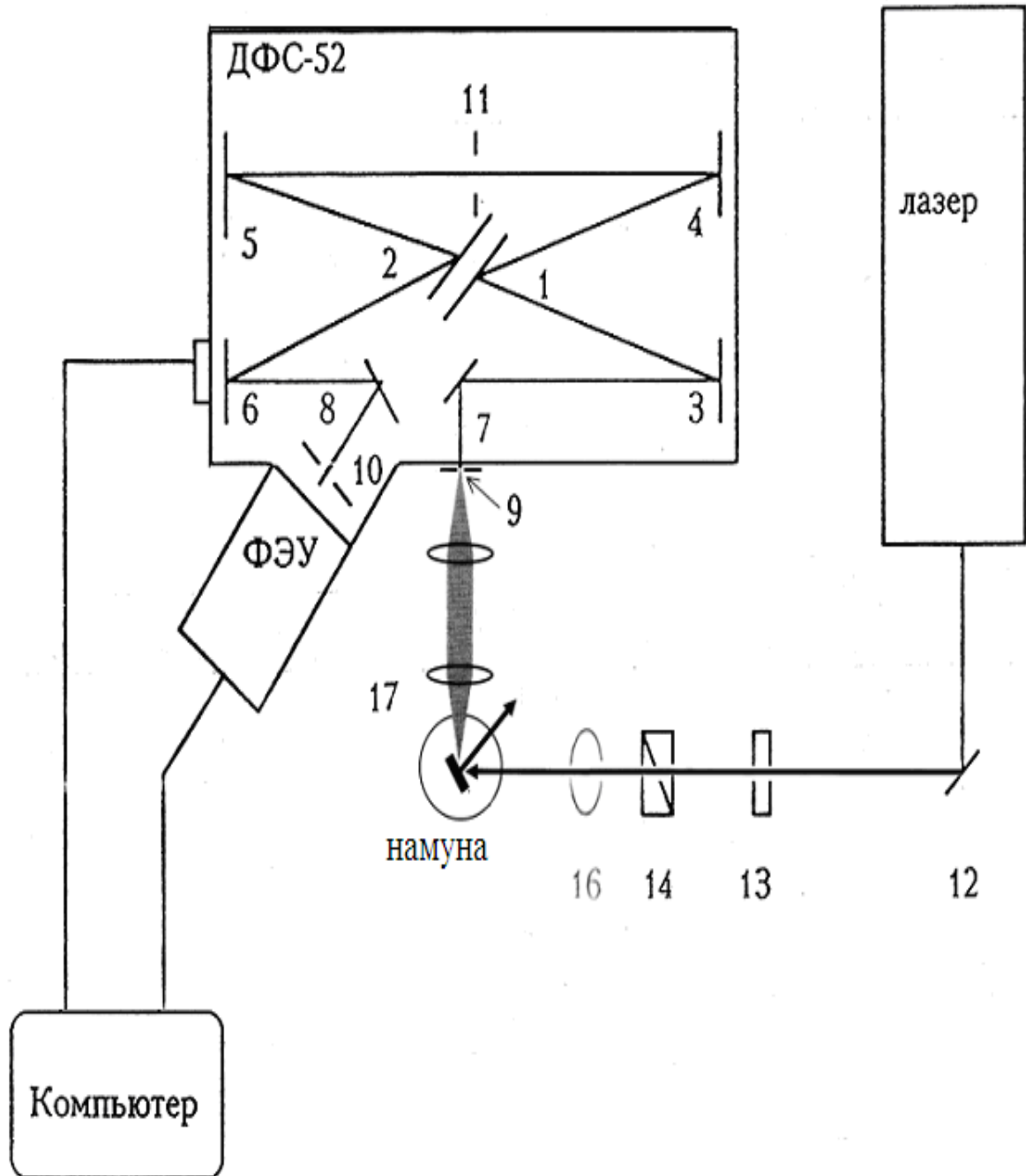
оқимлари тенг бўлса, клин ҳаракатсиз бўлади. Намунага келиб тушаётган нурнинг тўлқин узунлиги ўзгарса, мувозанат ҳам бузилади. Намунага тушувчи тўлқин узунлик ўзгариши билан мувозанат бузилади - сигналнинг баланси бузилиб, кучаяди ва клин ҳаракатини бошқарувчи ва қайд қилувчи билан боғланган сервомоторга келиб тушади. Референт оқим кучсизланишини компенсацияламайдиган ҳолатга келгунича клин алмаштирилиб турилади. Клининг ўзгариш диапазони тўлиқ очилишдан то тўлиқ ёпилишгача юз беради. Бу ҳол намунага тушувчи регистр коэффициентининг 0 дан 100% ўзгаришига мос келади. Одатда спектрометр икки ўлчамли шкалани бланкада спектрларни ёзиб олади. Абцисса ўқида тўлқин узунлиги λ ёки тўлқин сони ν (см^{-1}), ординатада - ўтиш коэффициенти қиймати T (%) ёки оптик зичлик $D = -\lg T$ (бу ерда $0 \leq T \leq 1$). Дунёнинг кўп мамлакатларида серияли ишлаб чиқарилган кўп сонли спектрометрлар 3 та асосий синфга бўлинади: 1) мураккаб универсал спектрометрлар- илмий тадқиқотлар учун ($R = 103—104$), ўрта синф асбоби ($R \approx 103$) ва оддий спектрометрлар ($R = 100—300$), мураккаб универсал спектрометрларда реплик, манба, қабул қилгич автоматик алмаштирилади ва бу кенг спектрал диапазони қабул қилиш имконини беради. Энг кўп тарқалган диапазонлар $0,19—3 \text{ мкм}$, $2,5—50 \text{ мкм}$ ва $20—330 \text{ мкм}$. Спектрометрнинг бу конструкцияси турли масштабдаги объектларнинг R , M , Δf ларнинг тезлиги ва кенг диапазонда ўзгарувчи қийматларини қабул қилишга имкон беради. Комбинацион сочилиш спектри ёруғликнинг 90-градусли геометрик сочилишида тушувчи ёруғликнинг турли геометрик кутбланишида юзага келади. Нурланишлар 1 мм да 1800 штрихли дифракцион панжарага эга бўлган ДФС-52 (ЛОМО) иккита монохроматорли қурилмада таҳлил қилинади. Қабул қилгич вазифасини совутилган фотонларни қайд қилиш режимида ишловчи ФЭУ-136 фотоэлектрон кучайтиргичи бажаради. Уйғотувчи сифатида тўлқин узунлиги $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ га тенг бўлган аргон лазеридан фойдаланилган. Лазер нури 16 объективдан

намунага тушади. Сочилган нурланиш эса 17 объектив орқали 9 ДФС-52 спектрометри монохроматорининг кириш тирқишига келиб тушади. Монохроматор ичкарасида ёруғлик 1 дифракцион панжарада тартибланади, кейин 4 кўзгу ёрдамида қурилманинг 11 ички тирқишига келиб тушади. ФЭУ томон йўналган нурланишнинг спектрал диапазони қўшимча аниқланади. 5 кўзгудан ўтган ёруғлик иккинчи дифракцион панжарага келиб тушади, бу ерда сигналнинг иккинчи спектрал жойлашуви юз беради.

Сўнгра 6,8 кўзгулар тизими орқали ёруғлик фотоэлектрон кучайтиргичнинг 10 кириш тирқишига келиб тушади. Шундай қилиб панжаранинг фиксирланган ҳолатидаги комбинацион сочилиш спекрининг сигнали тор соҳали спектрга айланади. Соҳанинг спектрал кенглиги панжаранинг дисперциялаш хоссасига яъни 1мм даги штрихлар сонига, кириш ва чиқиш тирқишларининг кенглигига бевосита боғлиқ. ДФС-52 спектрометри монохроматорида иккита 1800 мм/штрихли дифракцион панжара ишлатилади. Дифракцион панжаралар бурилганда (бу тизимда улар битта ўқга жойлаштирилган бўлиб, иккаласи бир вақтда бурилади) комбинацион сочилиш спектрининг сигнални частоталар бўйича сканерлаш юз беради. Монохроматордан ўтган сигнални фотонларни ҳисоблаш иш режимида ишловчи ФЭУ-136 фотоэлектрон кучайтиргич қайд қилади. ФЭУ-136 да қайд қилинган электр сигнал импульсларни ҳисобловчи тизимга, сўнгра компьютерга келиб тушади [14].



2.1-расм. ДФС-52 спектрометрининг ташқи кўриниши



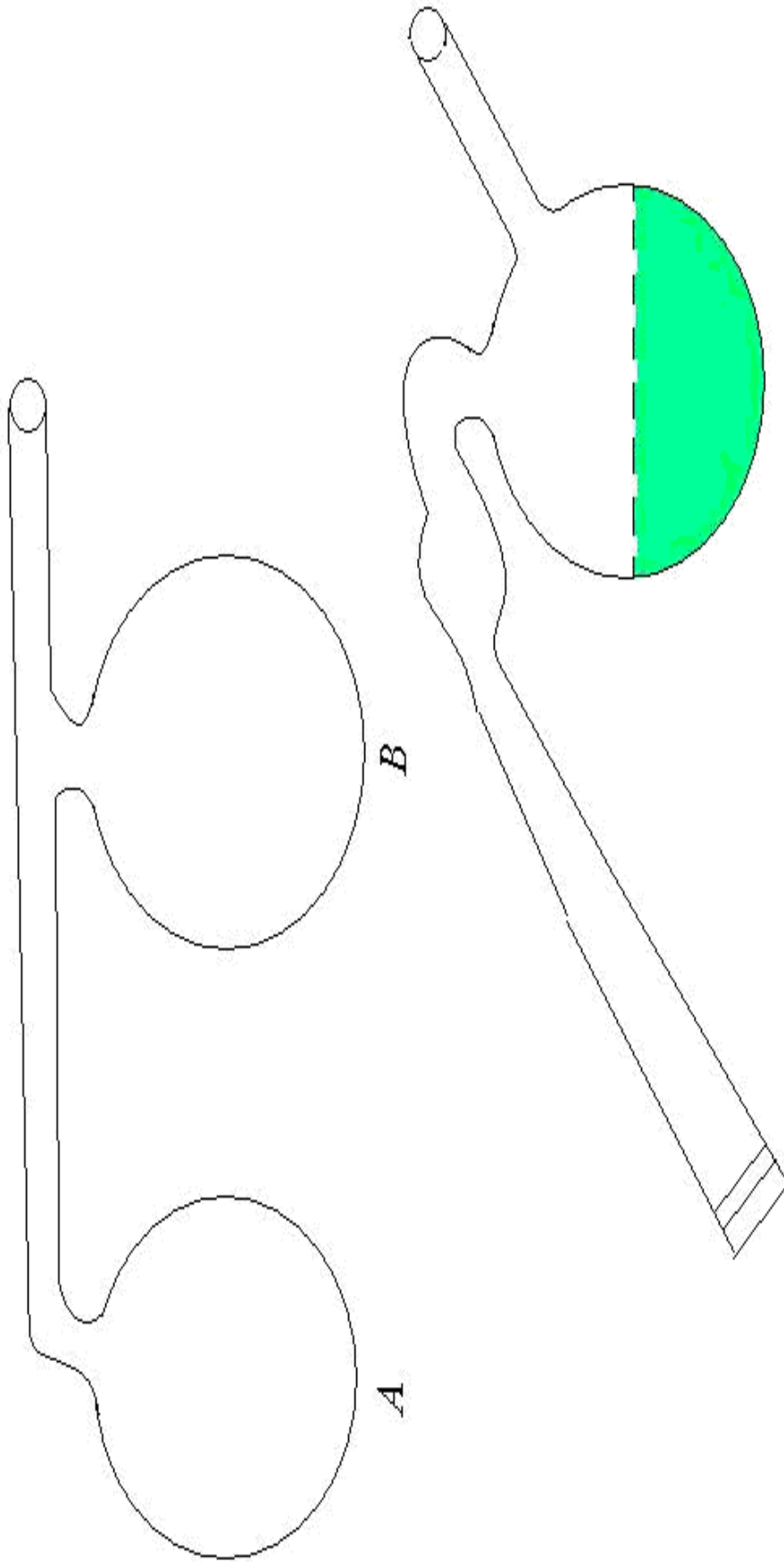
2.2-расм. Экспериментал қурилма схемаси.

1,2-дифракцион панжара, 3,4,5-монохраматорнинг сферик кўзгулари, 7,8-монохраматорнинг бурилувчи кўзгулари, 9,10,11- монохраматор тирқиши, 12-бурилувчи кўзгу, 13-лазер нурланиш фильтри, 14,15-нурланиш қутблагичи ва анализатори, 16,17-объективлар

2.2. Ўрганилаётган объектларни тажрибага тайёрлаш усули

Объектларни тажрибага тайёрлаш учун ўша текширилаётган намуна тоза бўлиши, чанг ва бошқа аралашмалардан ҳоли бўлиши шарт. Озгина аралашма ҳам молекуляр сочилишдан четланишга олиб келади. Текширилаётган модда кимёвий таркиби жиҳатдан ҳам тозаланган бўлиши керак. Тозалаш вакуум остида қайта ҳайдашдан иборат бўлиб, иккита бир-бирига уланган шиша шардан иборат 2.2- расм.

Энг аввало моддани тозалашдан олдин, шарлар ва Вуд трубкаси дистирланган сув билан чайилгандан сўнг, қуритиш шкафида қуритилади. Текширилаётган модда иккита бир-бирига уланган шарлардан бирига солинади. Кейин шарлардан бирига модда солинади ва маълум бир қайнаш температурагача печкада қиздирилади. Натижада қиздирилаётган шардаги модда таркибидаги чанг зарралари сув ва бошқа аралашмалар аста-секин ўша модда таркибидан четлаша бошлайди, яъни ўрганилаётган объект буғланиб шарлардан бирига ўтиб кетади. Тажрибага тайёрланаётган моддани шу йўл билан бир неча марта тозаланади ва ниҳоят тоза модда шарлардан бирида ўзи алоҳида тоза ҳолида қолади. **А** шарга суюқлик қўйилиб унга кислота ёрдамида ёки қуруқ муз ёрдамида ҳавоси сўриб олинади. Вакуум ҳосил қилингандан кейин **С** нуқтаси кавшарланади ва печкага қўйиб қайта ҳайдалади. **В** шар қайта ҳайдалган суюқлик билан кесиб олиниб Вуд трубкасига улангандан кейин яна қайта ҳайдаш йўли билан яна тозаланади. Вуд трубкасига ўтказилгандан кейин **Д** нуқтадан кесиб олиниб Вуд трубкаси таг қисми билан ёнбош қисмларидан ташқари ҳамма томони бўялади. Мақсад бошқа томонларга сочилган ёруғлик тўлқин ютилиши учун, юқорида айтилганлар бажарилгандан сўнг Вуд трубкаси тажрибага тайёр ҳисобланади [15].



2.2-расм. Вуд трубки

2.3. Аралашмалар тайёрлаш усули

Маълумки комбинацион сочилиш спектрининг сифати ва фойдали сигналнинг фанга яхши муносабатини олиш моддани тайёрлашга кўпроқ боғлиқ.

Моддани олдиндан тайёрлаш характерли ўлчаш учун яроқли спектрни олиш учун зарур бўлган қуйидаги асосий талаблар билан аниқланади.

- А) Молекулага тегишли бўлган сочилишни камайтириш учун хизмат қилувчи чанг заррачаларидан модда тоза бўлиши керак
- В) Модда флуоресценция бермайдиган бўлиши керак. Кўп ҳолларда флуоресценция тозаланмаган суюқликлардан оз миқдордаги аралашмалар борлиги туфайли келиб чиқади. Флуоресценция натижасида спектрни кузатишга, айниқса текширилаётган модданинг кам миқдорини ўлчашга ҳалақит берадиган кучли фон келиб чиқади.
- С) Модда иложи борича рангсиз бўлиши керак. Ҳамма текширилаётган моддалар “КТ” (кимёвий тоза) ёки “ТУТ” (тахлил учун тоза) маркада олинган, кенг қўшимча тозаланган бўлиши керак.

Суюқлик олдиндан фосфор беш оксиди ёрдамида қуритилади. Сув миқдори фоннинг кучайишига ва комбинацион сочилиш чизигининг ёйилиб кетишига олиб келади.

Бинор аралашмалар концентрацияси эритилган (аралаштирилган) модда молекулаларнинг сонини эритувчи модда молекулаларининг сонига нисбати билан ўлчанади (нисбий моль таркиб). Бинор аралашмалари солиштиришни осонлаштириш учун нисбий мол тартибни эритишга модда ва эритувчи ҳажмлар нисбати орқали ифодалаш мумкин.

I:I концентрацияда, яъни эритилган модда молекулаларининг сони эритувчи молекулага тенг бўлган концентрацияда нисбий моль таркибини моддалар ҳажмларининг нисбати орқали қуйидагича ифодалаш мумкин.

$$\frac{M_A \alpha_B}{m_B \alpha_A} = \frac{V_A}{V_B}$$

Бу ерда M_A ва m_B эритилган модда ва эритувчининг молекуляр оғирликлари, α_A ва α_B уларнинг зичликлари, V_A ва V_B ҳажмлардир.

Бу формуладан кўринадикки, исталган концентрацияни (моль) эритилган модда ҳажмининг эритувчи ҳажмига нисбатан орқали ифодалаш мумкин [16].

Идишни тўлдириш ва концентрацияни олиш учун шприцдан фойдаланилади. Бундай оддий қурилма зарур концентрацияни етарлича тез ва аниқ тайёрлашга имкон беради.

II. боб бўйича хулоса

Диссертациянинг иккинчи бобида тадқиқот ўтказиш учун ДФС-52 спектрометри базасида махсус тажриба қурилмаси йиғилди. Қурилма уч қисмдан иборат: ёритувчи, дисперцияловчи ва қайд қилувчи қисмлардан. Шу қурилманинг оптик чизмаси ва ишлаш усули батафсил келтирилди. Ёруғлик манбаи сифатида қуввати 1 Вт бўлган $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ тўлқин узунликли аргон лазеридан фойдаланилди.

Ўрганилаётган объектларни тадқиқотга тайёрлаш ва аралашмалар тайёрлаш усуллари келтирилган.

Тажриба техникаси ва методикаси тўлиқ ўрганилди ва қурилма тажрибага тайёрланди.

III. боб Тажриба натижалари ва уларнинг таҳлили

3.1. Ноэмпирик кванто-кимёвий ҳисоблашлар асоси

1970-1980 йилларда квант кимёсида ҳисоблаш усуллари жуда тез суръатлар билан ривожланди. Натижада геометрик структураларни, энергияларни, дипол моментлар, ўтишлар орасидаги ва тебранишлар частоталарини ҳисоблаш имкониятлари пайдо бўлди.

Тажириба билан олиш мумкин бўлмаган натижаларни ҳам кванто-кимёвий ҳисоблаш йўли билан аниқлаш имконини берадиган ва жуда тез ишлайдиган компьютерлар пайдо бўлиши билан бу соҳага янада қизиқиш кучайди. Кванто-кимёвий ҳисоблаш усуллари такомиллаштирилиб, бугунги кунда мураккаб системаларнинг тузилиш механизмлари тўғрисида маълумот олиш учун бу усуллардан кенг фойдаланиб келинмоқда.

Кванто-кимёвий ҳисоблашлар натижасида тажирибаларда спектрларини текшириш орқали турлича агрегатларнинг молекуляр характеристикаларини аниқлаш имкониятлари пайдо бўлди, бундан ташқари агрегатланган боғланишларда молекулаларнинг фазовий тузилиши ва ориентацияси аниқлаш имконини берадиган усуллар яратилди. Шундай қилиб, молекулалараро комплекслар моделида тажириба натижалар назарий ҳисоблашлар орқали тушунтириш бугунги кунда газ ва суюқ ҳолатлар физикасининг энг долзаб вазифаларидан бири бўлиб қолди.

Суюқ муҳитларда, танлаб олинган объектлар учун, водород боғланиш ва Ван-дер-вальс молекулалараро ўзаро таъсирлар орқали ҳосил бўладиган молекуляр агрегатларни ўрганишда янги экспериментал тадқиқотлар ва квант-кимёвий ҳисоблашлар ўтказиш йўли билан уларнинг “спектри, тузилиши ва хоссалари” орасидаги боғланишларни ўрнатиш ҳамда молекулалараро ўзаро таъсирларни, молекулалар агрегатланишини ва уларни ўраб турган муҳитнинг молекуланинг спектрал параметрларига таъсирини ўрганиш жуда катта амалий аҳамиятга эга.

Амалий масалаларни квант химиявий ҳисоблашлар ўтказиш орқали ҳал қилиш жараёнида қуйидаги масалаларга эътибор қаратиш талаб этилади:

Тайёр дастурлар асосида ўтказиладиган кванто-кимёвий ҳисоблашлар усулини танлаб олиш.

Молекуланинг термодинамик ва спектроскопик параметрларини аниқлайдиган замонавий кванто-кимёвий ҳисоблашларнинг аниқлик даражаси. Молекулар тузилиши ўрганишда ва амалиётда кванто-кимёвий ҳисоблашлар натижаларидан фойдаланиш даражаси.

Спектроскопик усуллар билан кванто-кимёвий ҳисоблашлар бири-бирини тўлдирган ҳолда ўрганилаётган объект тўғрисида тўлиқ маълумот олиш имкониятини яратади.

Умумий қилиб айтганда, кванто-кимёвий ҳисоблашлар таклиф қилинган моделнинг ўлчанган натижалар билан адекватлигини таъминлаш учун молекуляр системаларда маълум бир яқинлашишлар орқали Шредингер тенгламасининг ечимини топиш жараёни деб қараш мумкин.

Тажриба орқали олиш мумкин бўлмаган, мураккаб молекуляр тузилмаларнинг ва эффектларнинг хоссаларини ҳисоблаш учун кўпинча ноэмпирик ҳисоблашлар – «ab initio» (лотинчадан «Бошланғич») қўлланилади. Ноэмпирик ҳисоблашлар асосий усуллари Хартри –Фок –Рутан схемасига асосланади.

Хартри –Фок–Рутан схемасидаги мураккабликларни камайтириш учун жуда кўпчилик ҳолатларда электрон коррелляция инобатга олинса, кванто-кимёвий ҳисоблашларнинг яримэмперик усулларда эса молекулалараро ўзаро таъсир инобатга олинади.

Заррача ҳолатини тарифлашда, заррачанинг ҳар бир ондаги фазодаги (x, y, z) координаталарини аниқ қиймати ва импульснинг ўқлар бўйича ташкил этувчилари (R_x, R_y, R_z) нинг аниқ қийматларини аниқлаш тамойилидан келиб чиқилади. Шу билан унинг ҳаракат траекториясини ифодаловчи чизиқни кўрсатиши мумкин бўлади.

Реал заррачалар – микрообъектлар (электрон, атом, молекулалар) уларнинг махсус табиатига кўра ва физикада уларга мос келувчи объектларни мавжуд эмаслиги туфайли, таърифлаш мумкин эмас. Микрообъектларнинг координата ва импульсларни бир вақтда ўлчаш пайтида уларнинг қийматларида хатоликлар (аниқмасликлар) рўй беради, улар мос равишда D_x , D_y , D_z , DR_x , DR_y , DR_z га тенг бўлади. D_x ва DR_x хатоликлар бир вақтда исталган кичик бўлиши мумкин эмас ва координата қанчалик кичик хатолик билан ўлчанса, шунчалик катта хатолик билан импульс ўлчанган бўлади. Масалан, водород атомидаги электрон координатасига атом радиуси $D_{xq} r_q = 5 \cdot 10^{-11}$ м га тенг хатоликка йўл қуйиб, орбитал тезлиги $\mathcal{V}_q = 10^6$ мГц тезликда 10^{11} мГц хатоликни аниқлаймиз, бу деярли ёруғлик тезлигига тенг бўлиб, демак, электроннинг тезлиги умуман ноаниқ деган сўз. Бундан кўринадики, электрон координатасини аниқ ҳисоблаш мумкин эмас экан, ўз навбатида координатанинг бундай ноаниқлиги фазода электронинг "қўйилганлиги"ни айтиб туради ва микрообъект траекторияси тўғрисидаги тушунча маъносини йўқотади.

Микрообъектларнинг фазода тақсимоти эҳтимоллик характериға эга ва ниҳоят, уларни тўлқинлар назариясининг формулалари билан ёзилади.

Бу масалани, худди классик механикадаги Ньютон иккинчи қонуни ўйнаган рол каби, бу ерда Шредингер тенгламаси асосидаги квант механикаси ечади:

Бу ерда Ψ - пси-функция (тўлқин функцияси), унинг маъноси физика курсининг учинчи қисмида тушунтирилади, E – микрообъектнинг тўлик энергияси, U – унинг потенциал энергия. Бу тенгламанинг ечими, бирор эҳтимоллик билан микрообъектнинг берилган фазонинг нуқтасида бўлиши ва унинг энергияси ҳақида мулоҳаза юритиш имконини беради.

Электрон коррелляция - атом ёки молекуляр системаларда барча электронларнинг харакатини ўзаро бир бутунлигини характерловчи катталиқ. Коррелляция эса ўз навбатида электронларнинг ўзаро электростатик итаришиши (Кулоновская коррелляция) ва системанинг статик

афзалликлари (Паули принципи) орқали аниқланади. Кванто-кимёвий ҳисоблашларни ўтказиш вақтида жуда катта интегралларни ечишга тўғри келади, буни мазмуни шундан иборатки, ҳисоблашлар циклик равишда ўтказилади, яъни компьютер таъминлаши мумкин бўлган чегаравий аниқликга эга бўлинмагунча жараён такрорланаверади.

Ноэмпирик ҳисоблаш усуллариининг энг оддий усули – Хартри-Фок усули, бу усулда электронлар орасидаги коррелляция итаришиш кучлари инобатга олинмайди, фақатгина уларнинг таъсирлашишининг ўртача қиймати ҳисобга олинади.

Ушбу ишда олдимизга қуйилган мақсад, тажриба натижаларини кванто-кимёвий ҳисоблашлар билан таққослаш эди. Бу ҳисоблашлар тажрибада олинган натижаларни тўғрилигини таққослаш билан бирга, уларни таҳлил қилишни осонлаштиради.

Турлича ҳисоблаш усулларига асосланган кванто-химик ҳисоблашлар учун ишлатиладиган дастурлар бугунги кунда кўплаб яратилмоқда.

Бизнинг ишимизда қўлланилган ҳисоблашлар Гауссиан 98W дастури ёрдамида Хартри-Фок усулида амалга оширилди [17].

Диметилформамид молекуласининг мономер ва димер молекулсининг оптимизацияланган кўринишлари учун кванто-химик ҳисоблашлар Хартри-Фок усулида 6-31G(d) Гаусс функциялари ёрдамида амалга оширилди. Энергиялари бўйича оптимизация текширилаётган объект учун бутун ички координаталар бўйича амалга оширилди. Нормал тебранишлар частоталари умумий энергиядан иккинчи даражали ҳосила олиш ёрдамида ҳисобланди.

Кванто-кимёвий ҳисоблашлар натижаларида қуйидаги тартибда хатоликларни ҳисобга олиш талаб этилади:

- боғланиш узунликлари 0,01 – 0,02 Å гача аниқликда ҳисобланади;
- валент бурчаклар ~ 1 % гача аниқликда;
- энергиялар 2 ккал/мол гача аниқликда ҳисобланади.

- частоталар учун эса 10-12 % га юқори чиқади, тажриба натижалари билан таққослаш учун кўпайтувчи $0,89 \pm 0,01$ ишлатилади.

3.2. Пиридин ва унинг эритмаларини комбинацион сочилиш спектрлари

Тадқиқот объектларига қисқача тўхталадиган бўлсак, Пиридин битта азот атомли олти аъзоли ароматик гетероцикл ҳалқага эга, рангсиз, кучли ёқимсиз хидли суюқлик. Пиридин – кучсиз асосли, лекин минерал кислотали кучли туз ҳосил қилади. Осонгина иккиланган туз ва комплекс боғланишларни ҳосил қилади.

Пиридинни очилиш тарихи қуйидагича, у алхимёгарларга ҳам маълум бўлган модда бўлиб, унинг дастлабки ёзма берилишини 1851 йилда шотланд кимёгари Томас Андерсон фанга тақдим этди. Пиридинни биринчи бор суяк ёғини тадқиқ этиш вақтида қайд этди. Ёғсиз суякни қуруқ ҳайдаш орқали турли хил моддаларни ҳосил қилганда, уларнинг орасида рангсиз, ёқимсиз хидли суюқликни ҳам қайд қилади. Бу пиридин моддаси бўлишини айтади.

1869 йилда Кернернинг Каницарога ёзган шахсий хатида қуйидаги фикрни билдиради. Пиридиннинг тузилишини бензолга ўхшаш деб қараш мумкин. Чунки пиридинда ҳам худди бензолники сингари битта СН группа азот атоми билан алмашган. Кернер фикрича бундай формула нафақат пиридин синтезини тушунтириб қолмасдан, балки пиридин асосли оддий қатор аъзоларининг бешта углерод атоми борлигини ҳам кўрсатади.

Орадан бир йил ўтиб, 1870 йилда Дьюар (Dewar) Кернердан мустақил равишда пиридиннинг Кернер айтган формуласини таклиф этди. Дьюар формуласини тўғрилигини кейинроқ бошқа кимёгар олимларнинг пиридинни ўрганиш борасида олиб борган ишларидан билиб олди.

Кейинчалик пиридиннинг тузилиши билан Томсен, Бамбергер, Пехманн, Чамичан ва Деннштедт каби олимлар шуғулланишган.

1880 йилда Кенигс фақатгина ўсимликлар асосларидан иборат алкалоидларни ёғочли пиридин деб аташни таклиф этди. Лекин бугунги кунга келиб алкалоидларнинг анча характерли хусусиятлари аниқланганлиги ҳисобига, улар ҳақидаги тушунчалар чегараси анчагина кенгайган.

Пиридиннинг кимёвий хоссаларига тўхталсак, у учинчи аминларга хос характерли хоссаларни намоён этади, N-оксидларни ҳосил қилади. N- алкилпиридин лигандларда сигма-донор сифатида киришиш қобилиятига эга бўлиб, пиридин олишнинг асосий манбаи тошкўмир смола ҳисобланади. Шу билан бир вақтда аниқ ароматик хоссага эга. Бироқ ҳалқада азот атомининг қаршилиги электрон зичлигининг жиддий қайта тақсимланишига олиб келади, бу эса пиридинни бензолга нисбатан солиштирганда электрофильтр ароматик алмашиниш реакциясида жадаллигини кучли камайишига олиб келади. Бундай реакцияларда ҳалқанинг мета-жойлашуви асосий таъсир кўрсатади.

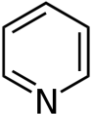

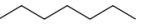
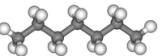

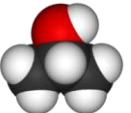
Пиридин учун ароматик нуклефил алмашиниш реакцияси характерли бўлиб, ҳалқадаги орто-жуфт жойлашинувга асосан юз беради. Бундай реакцияга киришувчанлик хусусияти пиридин ҳалқасида электрон етишмовчилик табиати мавжудлигини билдиради. Буни қуйидаги умумлаштирилган эмперик қоида билан тушунтириш мумкин. Пиридиннинг ароматик боғланишдаги реакцияга киришувчанлик қобилияти нитробензолнинг реакция киришувчанлик билан айнан мос келади.

Суюқликлар ва уларнинг турли хил эритмалари мураккаб системалар қаторида туради, айти вақтда суюқликларнинг ўзи мураккаб бўлиб, унинг тузилиши, аномал хоссалари, молекулалараро водород боғланиши ва молекуляр манзараси бўйича ҳозирги кунгача фаол илмий тадқиқот ишлари олиб борилмоқда. Суюқликлар ва уларнинг аралашмалари озиқ-овқат ва бошқа саноат тармоқларида, шунингдек, тирик организмларнинг фаолиятида ҳам муҳим ўрин эгаллайди. Шунинг учун ҳам суюқликларни ва уларнинг эритмаларини спектроскопик тадқиқ этиш долзарбдир.

Диссертацияда пиридин (C_5H_5N) ва унинг эритмаларида (гептан (C_7H_{16}) изопропил спирти (C_3H_8O) молекулалараро водород боғланиш мавжудлиги Раман спектри ёрдамида ўрганилган. Объектларни физика-кимёвий хоссалари қуйидаги 3.1-жадвалда келтирилган [14].

Ўрганилаётган объектларнинг физика-кимёвий хоссалари

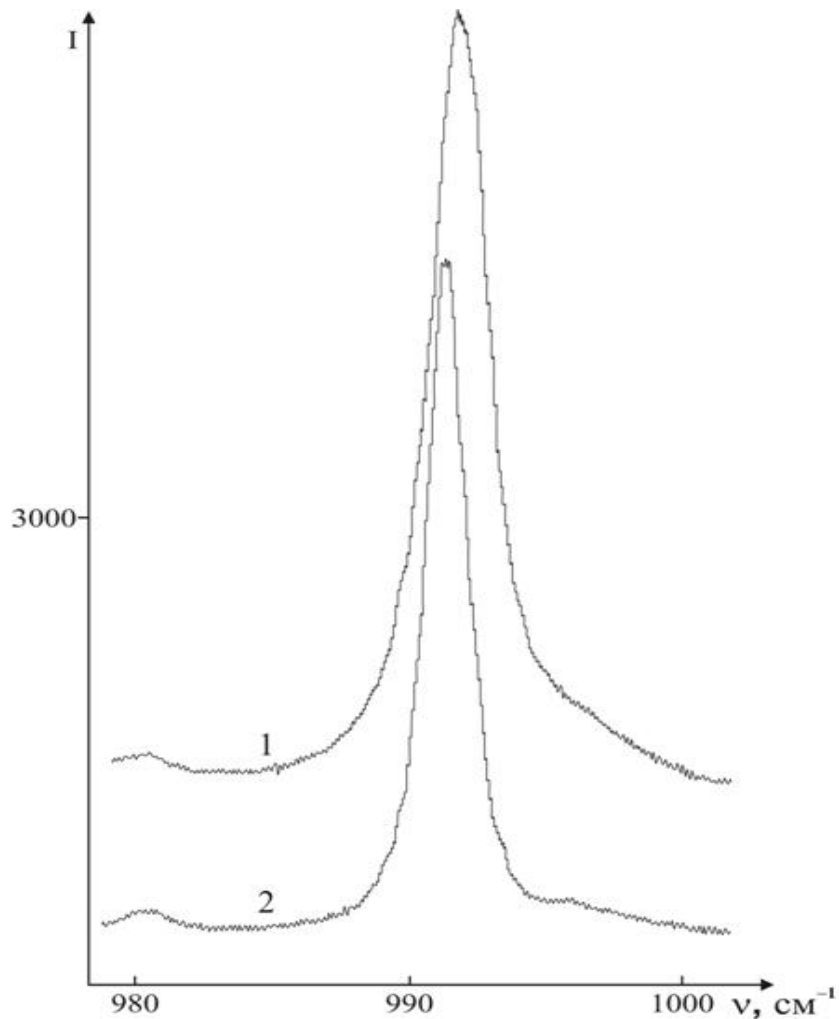
3.1-жадвал

Кимёвий мода	Кимёвий формуласи	Структуравий тузилиши	Моляр массаси М (г/моль)	Зичлиги ρ (г/см ³)	Ҳолати	Қайнаш ҳарорати t (С ⁰)	Эриш ҳарорати t (С ⁰)	Синдириш кўрсаткичи
Пиридин	C ₅ H ₅ N	 	79,101	0,9819	Суюқлик	115.2	-41,6	1,4077
Гептан	C ₇ H ₁₆	 	100,21	0,6795	Суюқлик	98,42	- 90,61	1,3062
Изопропил спирти	C ₃ H ₈ O	 	60,09	0,7851	Суюқлик	82,4	-89,5	1,3776

Тадқиқот натижалари автоматлаштирилган ДФС-52 спектрометрида қайд этилди. Уйғотувчи ёруғлик манбаи сифатида тўлқин узунлиги 488 нм бўлган аргон лазеридан фойдаланилди. Олинган тадқиқот натижаларини тўлароқ тушунтириш мақсадида кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди. Кванто-кимёвий ҳисоблашлар V3LYP яқинлашишда 6-31G (d,p) функциялар тўплами негизида амалга оширилди [17].

Пиридин молекуласи яхши протоноакцептор ҳисобланади ва протонодонор қобилятига эга бўлган сув, спиртлар ва шу каби моддаларда эритилганда молекулалараро водород боғланиш ҳосил бўлади. Водород боғланиш ҳосил бўлиши пиридин атомлари тебранишларида ўзига хос тарзда намоён бўлади. Масалан, пиридиннинг комбинацион сочилиш спектридаги 992 см⁻¹ спектрал чизиқ водород боғланиш ҳосил бўлганда паст частота

томонга силжийди, концентрация ўзгариши билан бу силжиш ўзгаради. Бу эса спектрал чизиқнинг мураккаб тузилишга эга эканлигидан далолат беради. Шу мураккабликга ойдinлик киритиш учун ҳам пиридин ва унинг турли эритмаларида Раман спектрлари ўрганилади. 3.1-расмда тоза пиридин ва унинг инерт эритувчи гептан билан эритилгандаги Раман спектри келтирилган.

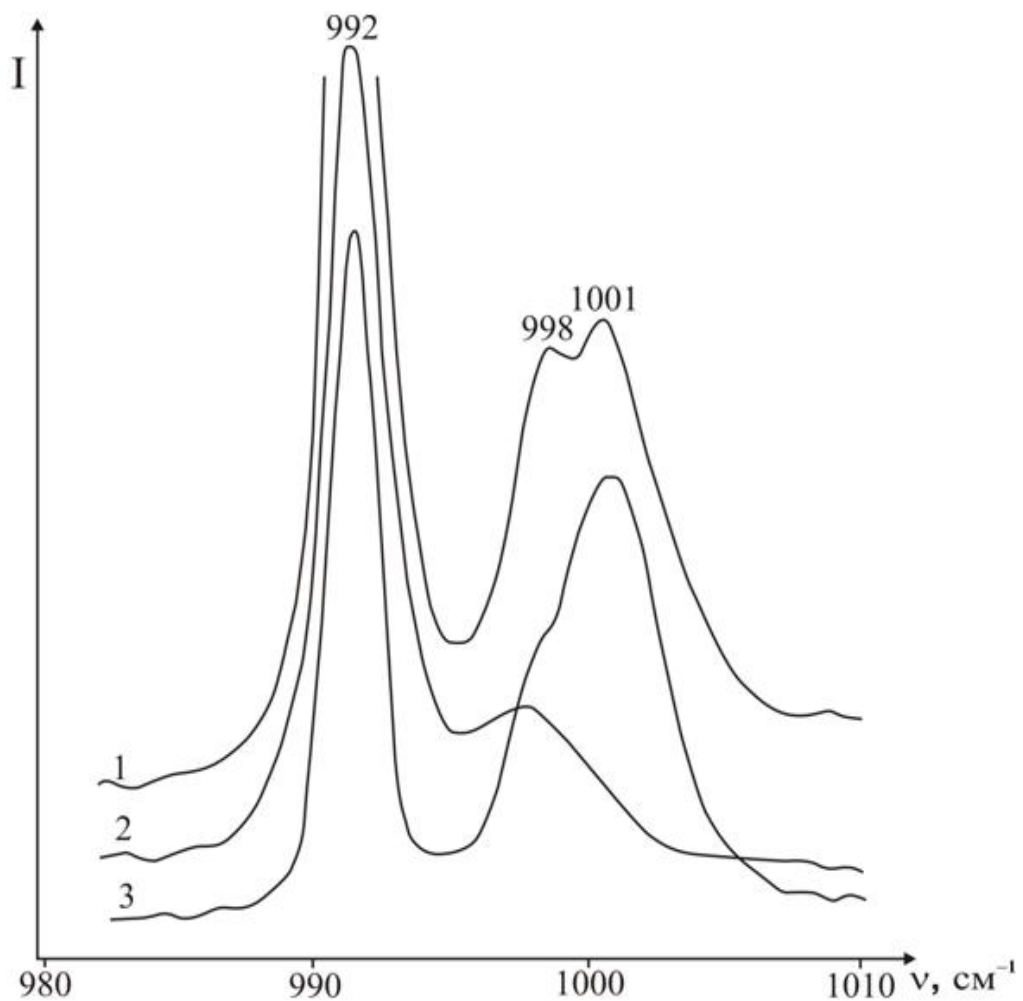


3.1-расм. Гептан арлашмасида пиридиннинг 992 см^{-1} спектрал чизиғи ($T=295^0 \text{ К}$, 1-тоза пиридин, 2-гептан+пиридин)

Пиридиннинг 992 см^{-1} спектрал чизиғи ярим кенглиги $2,5 \text{ см}^{-1}$ га тенг. Пиридинга инерт эритувчи гептани $0,8$ моль улуш қўшганимизда спектрал чизиқ торайиб, унинг ярим кенглиги $1,7 \text{ см}^{-1}$ га тенглиги аниқланди.

Худди шундай манзара пиридин-изопропил спирти ва пиридин-изопропил-гептан эритмаларида ҳам кузатилади (3.2-расм).

Кўп миқдорда гептан билан эритилганда спектрал чизиқ торайиб, пиридин мономерларига тегишли бўлган 992 см^{-1} спектрал чизиқ яққол намоён бўлади. Шунингдек пиридиннинг юқори тартибли агрегатларига тегишли иккита спектрал чизиқ кузатилади (3.2-расм). Булар 998 см^{-1} дан иборат бўлган паст частотали спектрал чизиқ - содда ассоциатларга ва 1001 см^{-1} дан иборат бўлган спектрал чизиқни - мураккаб ассоциатларга тегишли деб фараз қилиш мумкин.



3.2-расм. Гептан ва изопропил спирти эритмасида пиридиннинг 992 см^{-1} спектрал чизиғи тузилиши (1- 0,02-0,06-0,92; 2- 0,85-0,15; 3-0,51-0,95)

Шунингдек, спектрал чизиқларнинг мураккаблигини тушунтириш мақсадида спирт миқдорини 0,15 мол улушга камайтирилганда мураккаб ассоциатларга тегишли спектрал чизиқ йўқолиб, фақат содда ассоциатларга тегишли спектрал чизиқ кузатилади ва аксинча спирт миқдорини 0,95 мол

улушга оширганда, асосан мураккаб ассоциатларга тегишли спектрал чизиқлар кузатилди.

Демак, пиридининг содда ва мураккаб ассоциатларга тегишли спектрал чизиқлари инерт эритувчи гептан концентрацияси ортиши билан спектрларнинг ажрата олиш қобилияти ортади. Пиридин-изопротил спирт эритмасида эса спирт миқдорининг камайиши содда ассоциатларга тегишли спектрал чизиқларнинг намоён бўлишига олиб келса, изопротил спирт миқдорининг ошиши эса эритмада мураккаб ассоциатлар ҳосил бўлиш имконини ошириб, мураккаб ассоциатларга тегишли спектрал чизиқларнинг намоён бўлишига олиб келади [18].

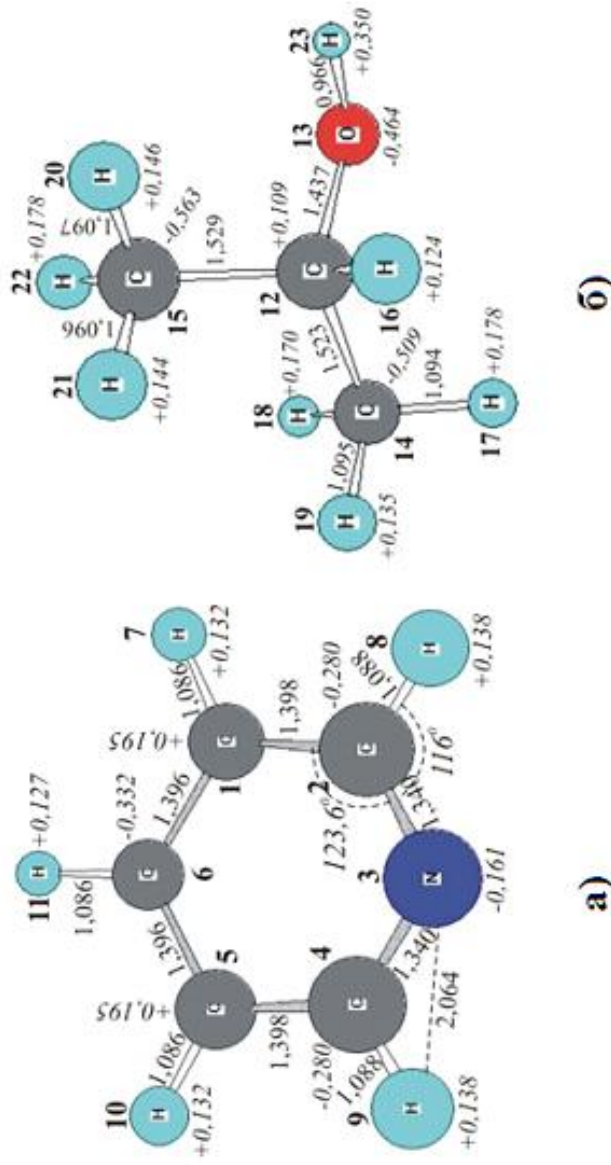
3.3. Кванто-кимёвий ҳисоблашлар ва тажриба натижалари таҳлили

Тадқиқот натижаларини тўлароқ тушунтириш мақсадида кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди. Ҳисоблашлар молекулалараро водород боғланиш намоён бўлишини яққол кўрсатди.

3.3-а-расмда пиридин молекуласининг мономери келтирилган, расмдан куришиб турибдики, ҳамма водород атомлари мусбат зарядланган, бунда H^8 ва H^9 атомлар зарядлари энг катта, азот атоми эса манфий зарядланган.

H^8N^3 ва H^9N^3 атомлар орасидаги масофалар бир хил ва $2,064 \text{ \AA}$ га тенг. Шунингдек, $H^8C^2N^3$ ва $H^9C^4N^3$ атомлар орасидаги бурчаклар 116° га тенг бўлса, $C^1C^2H^8$ ва $H^9C^4C^5$ атомлар орасидаги бурчак $123,6^\circ$ га тенгдир. Булардан шундай хулосага келиш мумкинки, H^8 ва H^9 атомлар азот атоми билан кучли ўзаро таъсирлашади. Бу эса молекула ичида ички водород боғланиш мавжуд деган хулосага олиб келади [19].

3.3-б-расмда изопропил спирти молекуласининг мономери келтирилган.

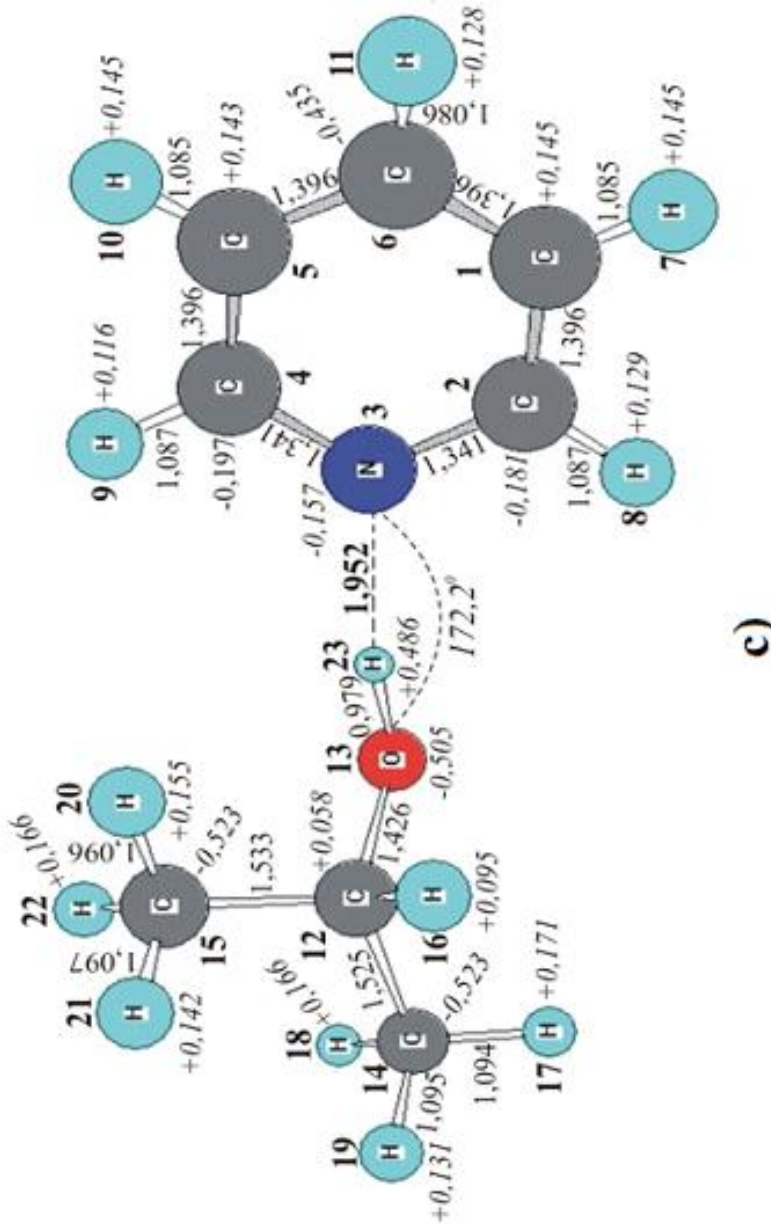


3.3-расм. а-пиридин молекуласининг мономер, б-изопропил спиртининг мономер

3.3-с-расмда пиридин ва изопропил спирти димери учун ҳисоблаш натижалари келтирилган. Расмдан кўриниб турибдики, водород боғланиш пиридин молекуласидаги азот (N) атоми билан изопропил спиртининг O-H гуруҳидаги водород (H) атоми орасида вужудга келади, бу ерда боғ узунлиги 1,952 Å га тенг.

Димер ҳосил бўлиш энергияси 5,1 ккал/молни ташкил этади. Пиридин молекуласида атомлар орасидаги масофа деярли ўзгармайди. $H^8C^2N^3$ ва $H^9C^4N^3$ бурчак худди мономердагидек 116^0 га тенг. H^8N^3 ва H^9N^3 атомларнинг боғ узунлиги бир-бирига яқин, яъни 2,064 Å и 2,065 Å га тенг. Водород боғланиш ҳосил қилган $O^{13}H^{23}N^3$ – бурчак эса $172,2^0$ ни ташкил этади.

Бунда зарядлар тақсимотининг ўзгариши кузатилади. Димер ҳолида азот атомининг заряди мономерига нисбатан бироз ошади, C^2 ва C^4 атомларининг заряди эса 1,5 марта камаяди [20].



3.3-расм. с - расмда пиридин ва изопропил спирт димери учун ҳисоблаш
натижалари келтирилган

Тажриба натижалари шуни кўрсатдики, Пиридин молекуласи ўзини протоноакцепторлик хусусиятини яхши намён этиб протонодонор қобилиятига эга сув ва спиртлар билан молекулалараро водород боғланиш ҳосил қилиши аён бўлди. Бу 992 см^{-1} спектрал чизиғи контурини шаклланишда яхши кўринмоқда.

Аралашмада содда ва мураккаб ассоциатлар мавжудлиги аниқланди. Тажриба ва назарий ҳисоблаш натижалари илмий манбалардаги натижаларга мос келмоқда [21-24].

Хулоса

1. Ёруғликнинг муҳитлардан комбинацион сочилиши, Рэлейча сочилишини назарий асослари ўрганилди. Изотроп ва наизотроп муҳитлар ва уларнинг физик табиати, молекулалараро ўзаро таъсир асослари ўрганилганда масала моҳиятини тўла тушунтирувчи назарий ишлар йўқлиги, экспериментал тадқиқотлар янада зарур эканлиги маълум бўлди.
2. Экспериментал тадқиқотлар ўтказиш учун ДФС-52 спектрометри базасида йиғилган юқори ажрата олиш қобилиятига эга бўлган автоматлаштирилган спектрал қурилманинг ишлаш усули ўрганилди ва тадқиқотлар ўтказилди.
3. Таркибида азот атоми мавжуд бўлган пиридин ва унинг гептан, изопропил спирти билан аралашмаларида комбинацион сочиши спектри қайд қилинди ва таҳлили ўтказилди.
4. Пиридиннинг $\nu = 992 \text{ см}^{-1}$ спектрал чизиғи контури ярим кенглиги $2,5 \text{ см}^{-1}$ га тенг эди. Инерт эритувчи гептан қўшиб ўрганилганда спектрал чизиқ торайиб $1,7 \text{ см}^{-1}$ га тенглиги аниқланди. Пиридин-изопропил спирти ва пиридин-изопропил-гептан эритмаларида 998 см^{-1} ва 1001 см^{-1} частотали иккита спектрал чизиқ кузатилди. 998 см^{-1} тебраниш содда ассоциатларга, 1001 см^{-1} тебраниш мураккаб ассоциатларга тегишлилиги аниқланди.
5. Спиртнинг улуши камайтирилганда 998 см^{-1} чизиқ йўқолиб, мураккаб ассоциатларга тегишли 1001 см^{-1} тебраниш мавжудлиги аниқланди. Пиридин-изопропил спирти эритмаларида спирт миқдорини ортиши эга мураккаб ассоциатларни пайдо бўлишига сабаб бўлмоқда.
6. Экспериментал тадқиқот натижаларини тўлароқ тушуниш учун кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди. H^8 ва H^9 атомлар азот атоми билан кучли ўзаро таъсирлашади ва молекулалар ичида ички водород боғ ҳосил қилади.

7. Пиридин молекуласининг N атоми билан изопропил спиртининг O-H гуруҳидаги водород атоми орасида молекулалараро водород боғланиш мавжудлиги аниқланди, боғ узунлиги $1,952 \text{ \AA}$ га тенг. Димер ҳосил бўлиши энергияси $5,1 \text{ ккал/моль}$ ни ташкил қилди. Водород боғланиш ҳосил қилган бурчак $\text{O}^{13}\text{H}^{23}\text{N}^3-172,2^0$ га тенг.
8. Тажриба натижалари шуни кўрсатдики, Пиридин молекуласи ўзини протоноакцепторлик хусусиятини яхши намоён этиб протонодонор қобилиятига эга сув ва спиртлар билан молекулалараро водород боғланиш ҳосил қилиши аён бўлди. Бу 992 см^{-1} спектрал чизиғи контурини шаклланишда яхши кўринмоқда.

Аралашмада содда ва мураккаб ассоциатлар мавжудлиги аниқланди.

Тажриба натижалари назарий ҳисоблаш натижалари билан илмий манбалардаги натижалар билан мос келмоқда.

Фойдаланилган адабиётлар руйхати

1. Каримов И.А. Юксак маънавият-енгилмас куч. Т.: “Маънавият” нашриёти, 2008.
2. Ландсберг Г.С. Оптика. Т.1981.
3. Qo‘yliyev V.T. Optika. Т.: “Fan va taraqqiyot” nashriyoti. 2014.
4. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: 1962.
5. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.1949.
6. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Москва. ИЛ, 1979.
7. Бахшиев Г.Л. Введение молекулярная спектроскопия.
8. Волькенштейн М.В. Строение и физические свойства молекул. изд. ГЛ., 1995. УФНТ 145.
9. Хабибуллаев П.К., Буллавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х. и др. Динамика молекул в жидкостях. Т. изд “Фан”, 2009.
10. М.Ф. Вукс "Рассеяние света в газах, жидкостях и растворах" Л. — 1977г.
11. Брандмюллер И. Мозер Г. "Введение в комбинационная спектроскопия" Мир - 1972 г.
12. Пиментал Д., О.Мак-Клелан. Водородная связь. Л.: 1964.
13. Технический описание спектрометра ДФС — 52.
14. Википедии — свободной энциклопедии. [http // www.Vikipediya](http://www.Vikipediya)
15. И.Т. Гороновский и др. Краткий справочник по химии. К.: 1987.
16. Варгафтик И.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: изд. “Наука”, 1972. - 368 с.
17. M.J.Frisch, G.W.Trucks, H.B.Schlegel, Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, (1998).
18. Тухватуллин Ф.Х., Қўйлиев Б.Т., Мейлиев Л.О., Равшанов Ж.Х.. Раман эффектида молекулалараро водород боғланишни намоён бўлиши// ҚаршиДУ ахборотномаси. Қарши, 2015.-№1.-Б.3-8.

19. Равшанов Ж., Турдиева З., Пармонов Ж., Давронов М., Саломов У. Спектры комбинационного рассеяния пиридина и его растворов // Физика фанининг ривожиди истеъдодли ёшларининг ўрни // Республика илмий-амалий конференцияси Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети. Тошкент, 2015. №8.-Б. 52-55.
20. Замоновий физиканинг ва астрофизиканинг долзарб муаммолари // III- Республика илмий-амалий анжумани. Қарши 2015.
21. Pavel Hobza, Zdenek Havlas. Chem. Rev., 2000; 100: P. 4253-4264
22. И.С.Перельгин, А.С.Краузе. Опт. и спектр. 1996; 81(6): С.929 – 934.
23. А.В.Жукова, М.В.Чулановский. Сб. Молекулярная спектроскопия. Изд. ЛГУ, 1960.
24. В.Р.Аsthana, V.Deckert, М.К.Шукла, W.Kiefer. J.Chem. Phys. Letters. 2000; 326: С.123-128
25. Интернет маълумотлари.
[http // www.iop.Kiev.ua/-nbp2011](http://www.iop.Kiev.ua/-nbp2011)
[http // WWW.XIXISSM.Kiev](http://WWW.XIXISSM.Kiev)
[http // www. Bankreferatov.ru.kasu.uz.](http://www.Bankreferatov.ru.kasu.uz)
[http // WWW.Ziyonet.uz.](http://WWW.Ziyonet.uz)
[http // WWW.Vikipediya](http://WWW.Vikipediya)