

Ўзбекистон Республикаси Олий ва Ўрта махсус таълим вазирлиги

Қарши Давлат университети

Қўл ёзма ҳуқуқида
УДК.535.36/539.22

Турдиева Захро Қаюмовна

**Қуйимолекулали углеводородлар тузилиши ва уларда
молекулалараро ўзаро таъсир кучларини комбинацион
сочилиш спектри орқали ўрганиш**

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

Магистр
академик даражасини олиш учун ёзилган
диссертация

Илмий раҳбар
Доцент Б.Т.Қўйлиев

Қарши-2015

Мундарижа

Кириш	3
I.Боб. Раман эффекти ва унинг физик асослари	
1.1.Муҳитлардан электромагнит нурланишларнинг молекуляр сочилиши.....	10
1.2. Раман эффекти ва унинг квант назарияси.....	16
1.3. Молекулалараро ўзаро таъсир асослари.....	25
1.4. Молекулаларнинг тебранма спектрлари.....	35
I.боб бўйича хулоса.....	44
II.Боб.Тажриба техникаси ва методикаси	
2.1. Комбинацион сочилиш спектрини қайд қилувчи тажриба қурилмаси ва унинг ишлаш усули.....	45
2.2. Юқори босимли кювета-термостат ва унинг ишлаш усули.....	52
2.3. Ўрганилаётган объектларни тажрибага тайёрлаш ва аралашмалар тайёрлаш усули.....	55
II.боб бўйича хулоса.....	59
III.Боб. Тажриба натижалари ва уларнинг таҳлили	
3.1. Қуйимолекулали углеводородларнинг (метан, этан) физика-кимёвий хоссалари.....	60
3.2. Қуйимолекулали углеводородларнинг комбинацион сочилиш спектри.....	66
3.3. Тажриба натижалари ва назарий ҳисоблашлар таҳлили.....	75
Хулоса	78
Фойдаланилган адабиётлар	80

Кириш

Биз яшаётган жамиятда иқтисодий ривожланиш жадал суръатларда бораётганлигининг шоҳидимиз. Бу ривожланишлар замирида фан-техника ютуқларидан самарали фойдаланиш ётади. Барқарор иқтисодий тизим яратиш жараёнида табиий ресурсларни оқилона тежамли сарфлаш зарурияти юзага келган бир вақтда энергия танқислиги барча мамлакатлар иқтисодида ўз сўзини айтмоқда. Келгусида бу муаммоларни ҳал этиш жуда долзарб муаммолар сирасига киради. Диссертация мавзуси кўйимолекулали углеводородларнинг физика-кимёвий хоссаларини ва комбинацион сочилиш спектрида молекулалараро ўзаро таъсир кучларини намоён бўлишини ўрганишга бағишланган.

Мавзунинг долзарблиги: Ҳозирги кунда асосан автомашиналарда, иситиш системаларида ва бошқа мақсадларда ёнилғи сифатида кўйимолекулали (метан, этан, пропан, бутан) углеводородлар кенг ишлатилади.

Юқорида келтирилган углеводородлар қайнаш температурасининг пастлиги билан ажралиб туради. Шунинг учун ҳам бу углеводородлар нормал шароитда яъни хона температурасида газ ҳолатда бўлади. Ушбу углеводородларни спектроскопик тадқиқ этиш ва спектроскопик хоссаларини билиш улардан кенг фойдаланиш имкониятини беради. Бу иқтисодий самарадорликни ошишига олиб келиши мумкин.

Муҳтарам Президентимизнинг 2011 йил 20 майдаги “*Олий таълим муассасаларининг моддий-техник базасини мустаҳкамлаш ва юқори малакали мутахассислар тайёрлаш сифатини тубдан яхшилаш чора тадбирлари тўғрисида*” ги ПФ-1533 сонли фармони Олий таълим муассасаларининг моддий-техник базасини мустаҳкамлаш ва юқори малакали мутахассислар тайёрлаш сифатини тубдан яхшилаш чора тадбирлари тўғрисида бўлиб, 2011-2016 йилларда Олий таълим муассасаларининг моддий техник базасини модернизациялаш ва

мутахассислар тайёрлаш сифатини тубдан яхшилаш бўйича қабул қилинган дастур Олий ўқув юртлари тарихида унутилмас дастур ҳисобланади. Айниқса, Олий таълим муассасаларида ташкил этиладиган замонавий илмий тадқиқот лабораториялари назарияни амалиёт билан амалий тажрибани фан билан боғлаш имкониятини беради. Шу сабабли Қарши давлат университетида “*Табиий бирикмалар ва полимерларни спектроскопик тадқиқ этиши*” мавзусида Олий таълим муассасалариаро илмий тадқиқот лабораторияси ташкил этилмоқда.

Бундай тадқиқотлар Қашқадарё вилоятида ўзига хос хусусиятга эга. Чунки Республикамизда ишлаб чиқиладиган нефть ва газ маҳсулотларининг асосий қисми шу вилоятга тўғри келади. Бундан ташқари вилоятда **Шуртан кимё комплекси, Шуртан газни қайта ишлаш комплекси, Муборак газни қайта ишлаш заводи, Дехқонобод калий заводи, Майданак баланд тоғ астрофизика обсерваторияларининг** мавжудлиги физика, кимё йўналишини тамомлаётган талабалардан газларда, суюқликларда, плазмада яъни конденсирланган муҳитларда содир бўлаётган физик жараёнларни яхши тушунишни, уларни юқори илмий савияда тадқиқ ва таҳлил қилишни билишларини талаб этади. Шунинг учун ҳам қуйимолекулали углеводородларни спектроскопик тадқиқ этиш ҳозирги кунда ўта долзарб ҳисобланади. Бу борада спектроскопия асосий анжом ҳисобланади. Шунинг учун тадқиқот мавзуси “Қуйимолекулали углеводородлар тузилиши ва уларда молекулалараро ўзаро таъсир кучларини комбинацион сочилиш спектри орқали ўрганиш” деб танланди.

Тадқиқот объекти ва предмети: Тадқиқот объекти қилиб, метан (CH_4), этан (C_2H_6) лар танланганлигини сабаби табиий газ асосан қуйимолекулали углеводородлардан ташкил топган бўлиб, унда метан, этаннинг улуши энг каттадир (метан 77-95 % гача, этан 2,8-3,5 % гача бўлиши мумкин). Улар ишлаб чиқаришда кенг ишлатилади. Буларни

тажрибада спектроскопик тадқиқ этиш амалда тўғри фойдаланишга олиб келиши ва мукаммал назарий ишланмаларни яратишга асос бўлиши мумкин.

Ишнинг мақсад ва вазифалари: Метан (CH_4), этан (C_2H_6) молекулаларининг тузилишини ва уларда содир бўладиган молекулалараро таъсир кучлари табиатини комбинацион сочилиш спектри орқали ўрганишдан иборат.

Вазифалари:

- Мавзу бўйича мавжуд назарий ва тажриба натижалари таҳлилни ўтказиш
- Оптик квант генераторларини ишлата олишни ўрганиш ($\lambda = 4880 \text{ \AA}$ тўлқин узунликли аргон лазерини)
- Босим ва температуранинг кенг интервалида ишлашга мўлжалланган кювета-термостатни ростлаш ва ишлаш усулини ўзлаштириш
- Ўрганилаётган тадқиқот объектларини тадқиқотга тайёрлашни ўрганиш
- ДФС-24 спектрометрида нозик оптик ростлашни ўзлаштириш
- Ҳар хил температура ва босимда тадқиқотлар ўтказиш
- Кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказиш
- Назарий ва тажриба натижаларини таҳлилни ўтказиш ва умумий хулосалар қилиш

Тадқиқотнинг асосий масалалари ва фаразлари: Маълумки, табиий газ миллион йиллар давомида ер қаърида органик моддаларни шаклланиши туфайли пайдо бўлган кўп компонентли газлар аралашмасидан иборат. Унинг таркибида куйимолекулали метан қаторидан (метан, этан, пропан, бутан, пентан) ташқари оз миқдорда углеводородли боғланишга эга бўлмаган аралашмалар ҳам бор, булар азот, ис газини, сераводород ва бошқалар.

Метан, этан хўжаликларда, автотранспортларда, иссиқлик электроэнергетикада катта иссиқлик берувчи, экологик жиҳатдан тоза

нисбатан арзон ёқилғи ҳисобланади. Бундан ташқари кимё саноатида ҳар хил органик кислота, синтетик полимерлар олиш учун дастлабки хом-ашё ҳисобланади. Шундай экан танланган объектларни оптик хоссаларини билиш улардан фойдаланиш самарадорлигини оширади.

- Ўрганилаётган объектларни комбинацион сочилиш спектрларини шаклланишига таъсир қилувчи омилларни аниқлаш
- Кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали спектрал чизиқ табиатидаги ўзгаришларни тушуниш
- Молекулалараро ўзаро таъсир табиатини тушуниш
- Зарядлар тақсимотини аниқлаш
- Олинган натижаларни олдинги ва кейинги тадқиқот ишлари билан солиштириш, умумий хулосаларга келиш

Мавзу бўйича қисқа адабиётлар таҳлили: Кейинги вақтларда комбинацион сочилиш спектроскопияси асосида қуйимолекулали углеводородларни тадқиқ этишга қизиқиш кун сайин ортиб бормоқда. Чунки ҳар бир моддани физика-кимёвий хоссаларини юқори аниқликда ўрганиш амалиётда жуда катта аҳамиятга эга. Чунки комбинацион сочилиш спектри ҳар бир моддани индивидуал оптик хоссаси ҳисобланади. Ўтган асрнинг 50-60 йилларида Г.С.Ландсберг ва М.А.Бажулинлар углеводородлар спектроскопияси тўғрисида монография эълон қилган эди. Ундан бери спектроскопиянинг имкониятлари чексиз кенгайди.

Ҳозирги кунда дуёнинг Россия, АҚШ, Канада, Корея каби йирик мамлакатлари билан бир қаторида мустақил Ўзбекистонни ҳам ЎЗМУ, СамДУ, ҚаршиДУ университетларида шу соҳада илмий тадқиқот ишлари олиб борилади. Бундай тадқиқотлар ўз қийинчиликларига эга, булар қурилмани ажрата олиш қобилиятининг пастлиги, барча талабларга тўла жавоб берадиган кюветаларни йўқлиги ва мукамал назарий қарашларни мавжуд эмаслиги. Шу сабабли илмий адабиётларда мавзуга оид маълумотлар кўп учрамайди.

Шунинг учун ҳам экспериментал тадқиқотлар жуда зарур ҳисобланади.

Тадқиқотда қўлланилган услубларнинг қисқача тавсифи: Ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектроскопияси, кванто-кимёвий ҳисоблашлар. ДФС-24 спектрометрида комбинацион сочилиш спектрини қайд қилиш технологияси.

Тадқиқот натижаларининг назарий ва амалий аҳамияти: Умуман ишлаб чиқариш саноатида қуйимолекулали углеводородлар жуда кўп ишлатилади. Улардан тўғри фойдаланиш учун уларнинг спектроскопик хоссаларини билиш муҳим аҳамият касб этади. Худди шундай қуйимолекулали углеводородларнинг молекулалараро ўзаро таъсирда иштирок этиш қобилиятини ўрганиш нафақат фанда, балки амалётда ҳам катта аҳамиятга эгадир. Чунки қуйимолекулали углеводородлар кимё, биология саноатида, ишлаб чиқаришда ва ёнилғи сифатида кенг ишлатилади.

Ушбу диссертация иши кафедрада 2015-2017 йилларга бажарилиши режалаштирилган А-13-39 “Углеводородлар (метан, этан, пропан, бутан в.б) таркибидаги газ ва суюқликлар (H_2S , CO_2 , H_2O в.б) миқдорини аниқлаш методини яратиш” амалий лойиҳа доирасида бажарилган.

Олинган натижалар ва илмий адабиётлардаги шунга ўхшаш маълумотлар молекулаларнинг тузилиши, спектроскопик доимийлар ва молекуляр физика, атмосфера физикаси бўлимларини ривожлантиришда ҳисса қўшиши мумкин. Тадқиқотлар натижалари илмий журналларда чоп этилган. Талабалар, магистрлар ва илмий тадқиқотчилар диссертацияларини тайёрлашда ва махсус курслардан маъруза тайёрлашда фойдаланиш мумкин.

Илмий янгилиги:

- Моддаларни комбинацион сочилиш спектрларини ўрганиш учун ДФС-24 спектрометри базасида тузилган экспериментал қурилма ўрганилди.

- Метан, этанларнинг керакли соҳада спектрлари қайд қилинди ва қайта ишланди.
- Метан ва криптон учун биринчи марта кванто-кимёвий таҳлил ўтказилди.
- Спектрларни структуравий тузилиши тушунтирилди.
- Зарядлар тақсимооти кванто-кимёвий ҳисоблашлар орқали аниқланди.
- Тажриба натижалари кванто-кимёвий ҳисоблаш ва илмий манбаларга асосланиб хулосаланди.

Натижаларнинг ишончлилиги ва хулосаларнинг асосланганлиги:

Тадқиқотлар ажрата олиш қобилияти юқори бўлган замонавий спектрометрдан фойдаланганлиги, кванто-кимёвий назарий ҳисоблашлар ўтказилганлиги ва назарий қарашлар таҳлилда қўлланилганлиги, илмий адабиётлардаги маълумотларга мослиги

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 2013-2014, 2014-2015 йиллар “Фан, тараққиёт ва ёшлар” конференциясида, СамДУ-2015 йил магистрларнинг 12-конференциясида, ЎзМУ-2014 йил “Физика фанининг ривожда истеъдодли ёшларнинг ўрни” республика илмий-амалий конференциясида (Тошкент 2014, 2015), Конденсирланган муҳитларда молекуляр спектроскопиянинг долзарб муаммолари IV халқаро конференциясида (Самарқанд 2013), Замонавий физика ва астрофизиканинг долзарб муаммолари III-Республика илмий-амалий анжуманида (Қарши 2015) маъруза қилинган ва Қарши ДУ Физика кафедрасида муҳокама этилган.

Иш натижалари бўйича 6 та илмий иш чоп этилган:

1. Куйлиев Б.Т., Нурматова Д.Ж., Эшнорова Д.М., Мустафоева Н.М., Турдиева З.Қ.. Влияния колебательной релаксации на формирование полосы ν_1 сферических волчков // ҚаршиДУ ахборотномаси. Қарши, 2014.-№1.-Б.3-5.
2. Куйлиев Б.Т., Мейлиев Л.О., Рахмонова М.А., Хужамбердиева Ж.Н., Турдиева З.Қ.. Спектры комбинационного рассеяния газообразного этана// III Международной конференции по Оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микроинаноструктурах// Фарғона- 2014. -Б. 99-102.
3. 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.
4. 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.
5. Турдиева З., Мейлиев Л., Хакбердиев Э., Махмадмуродова Ф.. Спектры комбинационного рассеяния природного газа//Физика фанининг ривожиди истеъдодли ёшларининг ўрни //Республика илмий-амалий конференцияси Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети. Тошкент, 2015. №8.-Б. 55-57.
6. Куйлиев Б.Т., Мейлиев Л.О., Бекмуродов З.О., Рахмонова М.А., Хужамбердиева Ж.Н., Мустафоева Н, Турдиева З.К. Определение компонентного состава природного газа по спектрам комбинационного рассеяния света//Замонавий физика ва астрофизиканинг долзарб муаммолари//III-Республика илмий-амалий анжумани.Қарши,2015. -Б.4-6

Ишнинг ҳажми ва тузилиши: Диссертация 81 саҳифадан иборат. Компьютерда терилган матнга эга бўлиб, кириш, 3 боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхатини ўз ичига олади. Расмлар – 34 та, жадваллар – 6 та, фойдаланилган адабиётлар сони – 34 та

I.Боб. Раман эффектининг физик асослари

1.1. Муҳитлардан электромагнит нурланишларнинг молекуляр сочилиши

Электронларнинг мажбурий тебранишлари туфайли пайдо бўладиган иккиламчи тўлқинлар ёруғлик тўлқини олиб келаётган энергиянинг бир қисмини четга сочиб юборади яни моддадан ёруғлик тарқалаётганда ёруғлик сочилиши керак. Бундай ҳодиса юз бериши учун ёруғлик тўлқиннинг ўзгарувчи майдон таъсири остида тебрана оладиган электронлар бўлиши етарлидир, бундай электронлар эса ҳар қандай моддий муҳитда етарли миқдорда бор. Бироқ шуни эса тутиш керакки, бу иккиламчи тўлқинлар ўзаро когерент бўлади ва демак, четга сочиб юборилган ёруғликнинг интенсивлигини ҳисоб қилишда уларнинг ўзаро интерференциясини эътиборга олиш керак.

Муҳитнинг бир жинсли ва иккиламчи тўлқинларининг когерент бўлиши ёруғлик сочилмаслигининг зарурий ва етарли шarti, маълумки, табиатдаги мавжуд барча муҳитлар идеал бир жинсли бўла олмайди. Реал муҳитларда турли сабаблардан пайдо бўлган оптик бир жинслимасликлар хамиша бўлади, бу эса ёруғликнинг баъзи ҳолларда жуда интенсив, баъзи ҳолларда заиф сочилишини тушунтиради. Френель мулоҳазаларига кўра биржинслиликнинг бузилиши бу фазовий биржинслиликларда юз берадиган дифракция ҳодисаларига сабаб бўлади, агар биржинслиликларнинг ўлчами кичик бўлса у туфайли бўладиган дифракция ёруғликнинг диффузияси ёки сочилиши дейилади [2,3].

Муҳитнинг бир жинслилигини бузиш учун унинг синдириш кўрсаткичининг доимийлигини бузиш керак. Синдириш кўрсаткичи эса муҳитнинг диэлектрик сингдирувчанлиги ε билан қуйидаги муносабат билан боғланган:

$$n = \sqrt{\varepsilon} \quad \varepsilon E = E + 4\pi P \quad (1.1)$$

Бу ерда $\varepsilon = 1 + 4\pi N\alpha$ тенглигини ҳисобга олсак, синдириш кўрсатгичи

$$n = \sqrt{1 + 4\pi N\alpha} \quad (1.2)$$

яни синдириш кўрсатгичи молекулалар сонига ва кутбланувчанлик коэффициентига боғлиқ ўзгаришини кўрамыз.

Ёруғлик сочилишини лаборатория шароитида биринчи бўлиб Тиндаль кузатган (1869 й) ва у турли бурчаклар ҳосил қилиб сочилган ёруғлик дастлабки оқ ёруғликдан кўк бўлиши билан фарқ қилишини, тушаётган ёруғлик йўналишига нисбатан $\pi/2$ бурчак ҳосил қилиб сочилган ёруғлик тўлиқ ёки қисман тўғри чизиқли кутбланишини тажрибада аниқлаган. Тиндаль осмоннинг зангори кўринишига Қуёш ёруғлигининг Ер атмосферасидаги чанг зарраларида сочилиши сабаб бўлса керак деб тахмин қилади. Зарраларнинг тўлқин узунлигига нисбатан кичик бўлган хира муҳитларда ёруғликнинг сочилишини ўрганиш натижасида Тиндаль ва ундан кейинги тадқиқотчилар тажрибада кашф этган ва назарий жиҳатдан Рэлей асослаб берган баъзи умумий қонуниятлар топилди.

Тиндал назариясига асосланиб Рэлей ёруғлик сочилиш назариясини яратди. Ёруғлик бирор муҳитга тушса муҳит молекулалари ёруғлик майдони таъсирида ўзгарувчан дипол моментига эга бўлади. Ўзгарувчан дипол ўз атрофига электромагнит тўлқинларни тарқата бошлайди. Бу электромагнит тўлқинлар тушувчи электромагнит тўлқинлар билан қўшилиб қайтган ва синган нурларни ҳосил қилади. Мана шу иккиламчи тўлқинлар сочилган ёруғликни ҳосил қилади.

Рэлей ўлчамлари тушаётган ёруғликнинг тўлқин узунлигига нисбатан кичик бўлган сферик зарраларда сочилган ёруғликнинг интенсивлигини 1899 йилда ҳисоб қилиб, дастлабки ёруғлик табиий ёруғлик бўлган ҳолда сочилаган ёруғликнинг интенсивлиги қуйидагига тенг бўлишини топди:

$$I = I_0 \frac{9\pi^2 \varepsilon_0^2 N (V')^2}{2\lambda^4 L^2} \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + \varepsilon_0} \right)^2 (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.3)$$

N – сочиб юборувчи ҳажмдаги зарралар сони, V' - ва ε - зарраларнинг ҳажми ва диэлектрик сингдирувчанлиги, ε_0 - зарралар муаллақ ҳолда юрган муҳитнинг диэлектрик сингдирувчанлиги, θ – сочилиш бурчаги, I_0 – тушаётган ёруғликнинг интенсивлиги, L – сочиб юборувчи ҳажмдан кузатиш нуқтасигача бўлган масофа.

Агар муҳит бир жинсли бўлса ҳар бир заррадан сочилган ёруғлик ўзаро когерент бўлади. Когерент нурлар интерференциялашади ва ҳисоблаш мумкинки, ҳар қандай зарра тарқатаётган когерент ёруғлик нурига тескари фазада, ёруғлик сочаётган зарра ҳам бор. Тескари фазада учрашган бу икки нур бир-бирини максимал сусайтиради. Рэлей формуласидаги муҳитнинг оптик жиҳатдан биржинслимаслигининг ўлчови бўла оладиган $(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 / (\varepsilon + \varepsilon_0)^2$ кўпайтувчи бор. Агар $\varepsilon = \varepsilon_0$ бўлса, муҳит бир жинсли бўлиб қолиб, ёруғлик ҳам сочилмай қўяди ($I=0$). Оптик жиҳатдан биржинслимасликнинг бундай ўлчови фақат майда зарраларгагина тегишли бўлиб қолмай, балки бошқа ҳолларда ҳам оптик биржинслимасликнинг характеристикаси бўла олади [4].

Изотроп муҳитга қутбланган ёруғлик тушса, 90° бурчак остида сочилган ёруғлик тўлиқ қутбланган бўлади. Табиий ёруғлик тушганда сочилган ёруғлик қисман қутбланган, унинг қутбсизланиш даражаси

$$\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} \quad I_{\parallel}=I_{xy}, \quad I_{\perp}=I_z \quad \text{деб оламиз. } X \text{ ўққа перпендикуляр, } Z \text{ га параллел.}$$

Шундай қилиб қутбланган ёруғлик тушганда $\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = 0$ бўлади, агар сочилиш бурчаги 90° га тенг бўлса. Аммо тажриба кўрсатадики бу ҳамма вақт ҳам нолга тенг эмас. Бунинг сабаби газ молекулалари ҳамма вақт ҳам изотроп эмас, анизотроп ҳам бўлади. Қутбланган ёруғлик тушганда

кутбсизланиш даражаси $0 < \Delta < \frac{3}{4}$, табиий ёруғлик тушганда кутбсизланиш даражаси $0 < \Delta < \frac{6}{7}$ ораликда ўзгаради.

Осмоннинг зангори бўлиб кўринишига ёруғликнинг чанг зарраларида сочилиши сабаб бўладигандек кўринар эди, бироқ тажрибалар бундай эмаслигини кўрсатди, чунки чанг бўлмаган тоза атмосферада (баланд тоғлардаги обсерваторияларда) осмон янада тўқ, зангори бўлиб кўринади ва унинг ёруғлиги кутбланади. Кейинги назарий ва экспериментал тадқиқотлар бу ҳодисаларнинг ҳаммасига ёруғликнинг ҳавода молекуляр сочилиши сабаб бўлишини кўрсатди. Муҳит аралашма ёки бошқа жинслардан яхшилаб тозаланган суюқликдан иборат бўлган ҳолда ёруғлик сочилади, оптик жиҳатдан биржинслимаслик пайдо бўлишига олиб келадиган физик сабабни Л.И.Мандельштам 1907 йилда аниқлади.

Оптик жиҳатдан бир жинсли бўлган муҳитда ёруғликнинг сочилишини кўп вақтлар тушунтириш имконияти бўлмади фақат 1908 йилга келиб поляк олими Смолуховский бир жинслиликни бузишга олиб келадиган сабабни кўрсатиб берди. Суюқликнинг критик температурасида ёруғлик интенсив сочилиши (критик ополосенция) кўпдан бери маълум эди. Смолуховский критик температурасида муҳитнинг сиқилувчанлиги жуда катта эканлигига диққат қилди (критик нуктада назарий томондан $(dV/dP)_T$ ифода чексизликка интилади). Бундай шароитларда кичикроқ ҳажмларда зртача зичликдан сезиларли четланишлар пайдо бўлиши мумкин, чунки сиқилувчанликнинг катта бўлиши иссиқлик ҳаракати кичик ҳажмларда зичликнинг сезиларли вариацияларини (зичлик флуктуациялари) юзага келтиришга қодир эканлигини билдиради. Оптик биржинслиликнинг бунинг оқибатида бўладиган бузилиши ёруғликнинг кўп сочилишига сабаб бўлади. Бизга ўлчамлари ёруғлик узунлигидан жуда кичик аммо ўзида кўплаб молекулани сиғдира оладиган элементар ҳажм берилган бўлса бу ҳажмдаги

$\Delta\rho$ зичлик флуктуацияси изотермик сиқилувчанликга тўғри пропорционал бўлади.

$$\Delta\rho^2 = \frac{\beta^2}{V} KT \left(-\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial\rho} \right) \dot{O} \quad (1.4)$$

Критик ополенсенцияда критик температурага яқин температурада ва критик температуранинг ўзида $\Delta\rho$ зичлик флуктуацияси ошиб кетади. Критик температурадан узокроқда ҳам $\Delta\rho^2 \neq 0$. Шу тенгсизлик ҳар қандай температурада ҳам зичлик флуктуациясини борлигини кўрсатади ва бу ёруғлик сочилишига сабаб бўлади. Зичлик флуктуациясининг берилган ҳажмдаги молекулалар сони билан ҳам ифодалаш мумкин. Шу элементар бир ҳажмдаги молекулаларнинг ўртача сонини

$$N = N_1 V \quad (1.5)$$

V - элементар ҳажм, $N_1 - 1\text{см}^3$ ҳажмдаги молекулалар сони, N - шу ҳажмдаги молекулалар ўртача сонини четланиши, N ни ΔN деб оласак (1.13) тенглама қуйидагича бўлади.

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

Ҳисоблашлар кўрсатадики ўртачадан оғишнинг ўртача қиймати нол эканини кўрсатади.

$$\Delta \bar{N} = N - \bar{N} = 0 \quad (1.7)$$

Лекин бу оғишнинг ўртача квадрати қиймати нолга тенг эмас.

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

$$(\Delta \bar{N})^2 = \bar{N}^2 - \bar{N}^2 = \bar{N} \quad (1.8)$$

(1.8) га зичлик флуктуациясининг молекулалар сони бўйича ифодаси дейилади. Зичлик флуктуацияси ўз навбатида диэлектрик сингдирувчанлик флуктуациясига сабаб бўлади. Бу флуктуацияси оптик жиҳатдан бир жинсли бўлган муҳитда ёруғликнинг сочилишига сабаб бўлади. Смолуховскийнинг шу ғояси Эйнштейн томонидан ёруғлик сочилишини назарий тушунтиришга олиб келди [5,6].

1.2 Раман эффе́кти ва унинг квант назарияси

Рэлей сочилишида сочилган ёруғлик частотаси тушувчи ёруғлик частотасига мос келади. Сочилишнинг бундай турини биринчи бўлиб Рэлей аниқлагани учун бундай сочилиш Рэлей сочилиши деб юритилади. Бу сочилиш когерент тарзда юз беради. Шу сабабли ҳам Рэлей сочилиши – ёруғликнинг когерент сочилишидир. Бироқ синчиклаб ўтказилган текширишларнинг 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 [7].

- 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 чапда уйғотувчи частоталардан узунроқ тўлқинли томонда жойлашган йўлдошларнинг частоталарини, ўнгда 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 .

Бу сочилишни қўйидагича таърифлаш мумкин: Сочилган ёруғлик частотаси ν' тушувчи ёруғлик частотаси ν_0 билан молекулаларнинг хусусий тебраниш частоталари комбинациясидан иборат $\nu' = \nu_0 \pm \nu_i$. Шунинг учун ҳам комбинацион сочилиш дейилади.

Комбинацион сочилишни биринчи бўлиб Г.С.Ландсберг ва Л.И.Мандельштамлар ҳамда ҳинд олимлари Раман ва Кришнанлар кашф этишган (1928-йил). Ҳинд олимлари Нобел мукофотига сазовор бўлишган. Чет эл адабиётларида Раман эффекти деб ҳам юритилади. Бу сочилиш одатда комбинацион сочилиш дейилади.

Комбинацион сочилиш ҳодисаси мумтоз назария нуқтаи назаридан қўйидагича тушунтирилади. Ушбу ҳодисада йўлдошларнинг пайдо бўлиш сабаблари 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_0 – ўртача қиймат атрофида тебранади, буни қўйидагича изоҳлаш мумкин:

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

Ушбу тебранишларнинг частотаси 10^{12} - 10^{13} Гц бўлиб, электромагнит тўлқинлар шкаласининг инфрақизил спектри соҳасига тўғри келади. Бошқача айтганда, $\alpha(t)$ катталиқнинг ўзгариши тушаётган ёруғликнинг ($\approx 10^{15}$ \AA) электр майдонининг тебранишига нисбатан секинроқ ўзгаради. Шу сабабга кўра тушаётган ёруғлик тўлқинининг монохроматик майдонида молекуланинг дипол моментининг ўзгариши:

$$p(t) = \alpha \cdot E = [\alpha_0 + F(t)]E_0 \cos \omega t \quad (1.9)$$

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

Бу жараёнда сочилган ёруғлик майдон кучланганлигининг тебраниши ҳам модуляцияланади. Бу тебранишларнинг элтувчи частотаси тушаётган ёруғлик тўлқинининг 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 маълумот беради. Бу спектрни ўрганиш ва таҳлил этиш орқали молекула структураси ва тузилишини билишга муваффақ бўламиз.

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

$$I_\nu = \frac{16\pi^4 \nu^4}{3c^2} \alpha^2 E_0^2 \quad (1.10)$$

га тенг бўлган монохроматик нур чиқаради.

$\alpha \neq const$ ҳол учун, яъни сочувчи муҳит молекуласининг қутбланувчанлиги ўзгарувчан бўлса у ҳолда молекуланинг дипол моменти ҳам вақт бўйича ўзгаради. Умуман, молекула қутбланувчанлиги ядро тебранишини дипол тебранишларида иштирок этиши сабаби билан ҳам ўзгариб туриши керак. Электронлар билан ядрони ўзаро боғланганлиги сабабли мажбурий ν частотада тебранаётган электронлар ядронинг ҳам

тебранишини юзага келтиради. Бироқ ядронинг массаси электроннинг массасига нисбатан ниҳоятда катта бўлгани учун ядронинг тебраниши жуда ҳам кучсиз бўлади. Бу эса молекуланинг кутбланишини ўзгаришига олиб келади. Натижада сочилган ёруғликнинг частотаси ўзгаради ва силжиш нокогерент бўлиб қолади [8].

Шундай қилиб, мумтоз электродинамика сочилган ёруғлик спектрида силжимаган чизиқнинг (ν) ҳар икки томонида ν_i масофага симметрик силжиган чизиқлар – йўлдошларнинг пайдо бўлишини тўғри тушунтириб беради ва уларнинг интенсивлиги

$$I_{S,A} = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_R^{S,A})^4 \alpha^4 E_0^2 = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_0 \mp \nu_i)^4 \alpha^4 E_0^2 \quad (1.11)$$

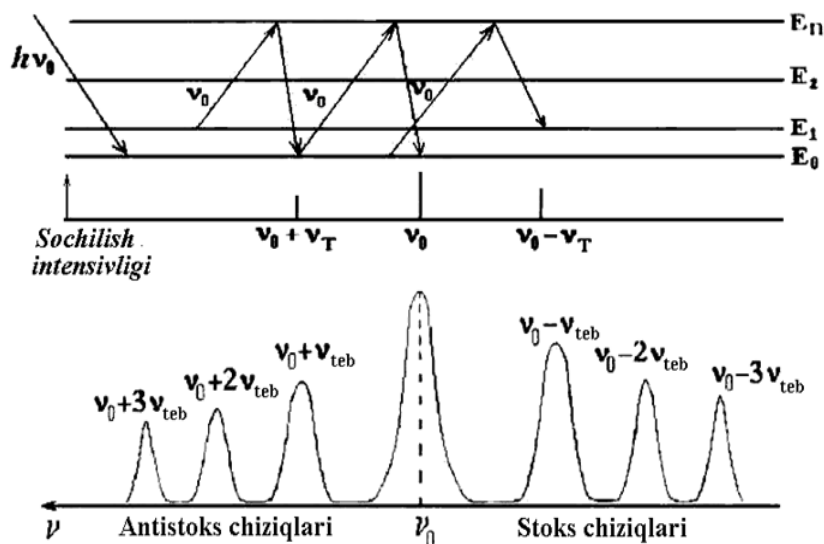
формула билан ҳисобланади. Бунда $\nu_R^{S,A}$ - раман частотаси (стокс ва антистокс чизиқлари учун).

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. Мумтоз физика қизил ва бинафша йўлдошларнинг интенсивликлари орасидаги ушбу миқдорий фарқни тушунтириб бера олмади. Ёруғликнинг комбинацион сочилишдаги интенсивликларнинг миқдорий муаммосини фақат квант тасаввурлари асосида тўғри тушунтириш мумкин [9,10].

Ёруғлик квантлари тўғрисидаги содалаштирилган тасаввурдан фойдаланиб, комбинацион сочилиш ҳодисасининг моҳиятини англаб этиш мумкин. Квант тасаввурларига асосан, ν_0 частотали ёруғлик маълум бир улушлар (квантлар) тарзида тарқалиб, буларнинг миқдори $h\nu_0$ га тенг, бу ерда $h = 6,62 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ - Планк таклиф этган универсиал 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 нуктаи назардан ёруғликнинг молекулаларда сочилишини ёруғлик квантларининг (яъни фотонларнинг) молекулалар билан тўқнашиши деб қараш мумкин. Бу тўқнашиш натижасида фотонлар учиш йўналишини ўзгартиради. Фотонлар билан молекулалар ўртасидаги тўқнашишлар эластик ва ноэластик бўлади. Тўқнашиш эластик тўқнашиш бўлган ҳолда молекуланинг энергияси ва фотоннинг ν_0 частотаси ўзгармайди, бу ҳол Рэлей сочилишига мос келади. Рэлейча сочилиш пайтида сочилган ёруғлик квантларининг частотаси муҳитга тушаётган ёруғлик квантларининг частоталарига мос келади. Шунинг учун ҳам Рэлейча сочилишга эластик сочилиш ҳам дейилади.

Тўқнашиш ноэластик бўлган ҳолда фотоннинг энергияси $h\nu_i$ тебранма квант миқдориди ўзгаради. Агар ёруғлик тебраниш ҳолатида бўлмаган молекула билан ўзаро таъсир қилса, ёруғлик молекулага энергиясининг тегишли қисмини бериб, $h\nu' = h\nu_0 - h\nu_i$ уoki $\nu' = \nu_0 - \nu_i$ 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, $h\nu = h\nu_0 + h\nu_i$ уoki $\nu' = \nu_0 + \nu_i$ тенгламага мувофиқ равишда катта частотали нурга (бинафша йўлдош, антистокс чизиғига) айланади. Буни 1.1- расмдан осонгина тушуниш мумкин.



1.1-расм. Рэлей ν_0 ва комбинацион $\nu_0 - \nu_{me\delta}$ ва $\nu_0 + \nu_{me\delta}$ сочилиш спектрларини ҳосил бўлишига олиб келадиган энергетик сатҳлар орасидаги ўтишлар

Тебраниш ҳолатида бўлган молекулалар сони ўйғотилмаган 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 ўйғотилган 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:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{\left(1 - \bar{a} \frac{h\nu}{\hat{E}\hat{O}_2}\right)}{\left(1 - \bar{a} \frac{h\nu}{\hat{E}\hat{O}_1}\right)} \quad (1.12)$$

Бундан кўринадики, стокс чизиқларининг интенсивлиги температурага тесқари пропорционал экан. Антистокс чизиқлариники эса температурага тўғри пропорционал бўлади:

$$\frac{I_{T_1}}{I_{T_2}} = \frac{e^{-\frac{hv}{KT_1}}}{e^{-\frac{hv}{KT_2}}} \quad (1.13)$$

Стокс ва антистокс чизикларининг интенсивликлари нисбати:

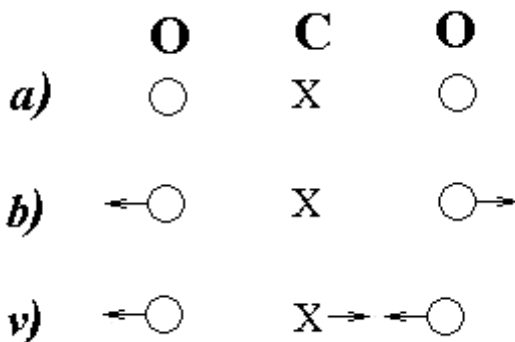
$$\frac{I_{as}}{I_s} \approx \left(\frac{\nu_0 + \nu_{teb}}{\nu_0 - \nu_{teb}} \right)^4 \quad (1.14)$$

каби бўлиб, бундан кўринадики частотанинг тўртинчи даражасига пропорционал экан.

Ҳақиқатда, ν частотали комбинацион чизикнинг 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.

Инфрақизил спектрида актив бўлган тебранишлар комбинацион сочилиш спектрида актив бўлмайди ва аксинча.

Масалан: CO_2 молекуласида атомлар тебранганда (1.2b-расм) уларнинг жойлашиши шундай ўзгарадики, бунда молекуланинг қутбланувчанлиги кўп ўзгариб, унинг электр momenti ўзгармайди, чунки кислороднинг бир хил ишорали зарядланган икки атоми (0) тебраниш вақтида углерод зарядидан икки тарафга симметрик жойлашганича қолаверади.



1.2 - расм. CO_2 молекуласида атомлар тебранишининг хиллари
a – атомларнинг дастлабки вазияти;
b - қутбланувчанликни ўзгартирадиган тебраниш;
v - электр моментини ўзгартирадиган тебраниши.

Бошқача тебранишда (1.2v -расм) кутбланувчанлик ўзгармайди, чунки кислород атомларидан бири углеродга яқинлашганда иккинчиси узоқлашади ва аксинча, бироқ бу тебранишларда молекуланинг электр моменти ўзгаради.

Шунинг учун биринчи тур тебранишда (1.2b-расм) комбинацион сочилиш чизиғи пайдо бўлади, бу чизиқнинг частотасини комбинацион сочилиш спектридан аниқлаш мумкин; иккинчи тур тебранишда (1.2v -расм) частотани инфрақизил ютилиш полосасининг вазиятига қараб топиш мумкин.

Комбинацион сочилиш усули модданинг молекуляр тузилишини тадқиқ этишнинг муҳим усули ҳисобланади. Молекула тебранишларининг хусусий частоталари бу усул ёрдамида осонгина аниқланади, бу усул 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 инфрақизил ютилиш усули 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, хатто анализ қилиб бўлмайдиган органик молекулалар аралашмаларини анализ қилиш мумкин. Масалан, углеводородларнинг жуда мураккаб аралашмаси бўлган бензинларнинг таркиби комбинацион сочилиш усули ёрдамида самарали равишда анализ қилинади.

Юқорида гап дастлабки нурланишнинг муҳит молекулалари билан ўзаро таъсир қилишда пайдо бўладиган комбинацион сочилиши тўғрисида борди. Ёруғликни атом ёки ионлар сочиб юборганда ҳам шунга ўхшаш ҳодиса юз беради. Масаланинг моҳиятига тушуниб етиш учун атом ҳолидаги газларда ёруғликнинг ютилиши ва дисперсиясини ўрганиш натижаларини эсга олиш

керак бўлади. Атомни осцилляторлар тўплами деб қараш мумкин, бу осцилляторларнинг хусусий частоталари атомнинг ихтиёрий икки квант ҳолатидаги энергиялари айирмаси билан аниқланади. Шунинг учун атомлар билан молекулалар ўртасидаги фарқ фақат осцилляторлар табиатида бўлади. Молекула бўлган ҳолда осцилляторлар ядролар ҳаракатини тавсифлайди, атомлар ҳолида эса осцилляторлар электронлар ҳаракатини тавсифлайди. Бу ўхшашликни назарда тутиб, юқорида юритилган мулоҳазаларни мумтоз модуляцион манзара нуқтаи назаридан ҳам соддалаштирилган квант чизма нуқтаи назаридан ҳам энди атомларга нисбатан такрорлаш мумкин.

Фотонларнинг эластик бўлмаган сочилиши уларнинг атомлар билан қиладиган ўзаро таъсирга асосланиб назарий равишда олдиндан айтилган эди (А.Смекал 1923-йил). Бироқ бу ҳодиса тажрибада молекуляр комбинацион сочиладан анча кейин топилди. Ионларнинг комбинацион сочиш ҳодисаси 1963-йилда, атомларнинг комбинацион сочиш ҳодисаси 1967-йилда топилди.

Ёруғликнинг комбинацион сочилиши ҳодисасини мумтоз 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 идентификациялаш (ажратиш) да комбинацион сочиш усули муҳим анжомдир [11].

1.3. Молекулалараро ўзаро таъсир асослари

Агар жисмлар бир агрегат ҳолатдан иккинчи агрегат ҳолатга ўтса (масалан газдан суюқликка) унинг нафақат физика-химиявий хусусиятлари балки спектроскопияси ҳам ўзгаради. Яъни спектрларнинг интенсивликлари формаси диполяризация коэффиценти, частотаси ўзгаради. Бу ўзгаришлар молекулалараро ўзаро таъсир кучлари билан боғлангандир. Қуйидаги 1.1-жадвалда моддаларнинг инфрақизил ютилиш спектрида газ ҳолатига нисбатан, суюқ ҳолатида частоталарнинг силжиши кўрсатилган.

1.1-жадвал [12]

Молекула	Эритма	$\Delta\nu$ (см ⁻¹) спектрнинг силжиши
HF	CCl ₄	-110
HCl	CCl ₄	-55
DCl	CCl ₄	-41
HBr	CCl ₄	-40
HI	CCl ₄	-26

Бугунги кунда молекулалараро ўзаро таъсир спектроскопиясига тегишли бўлган бир нечта қонунлар топилган. Бу қонуниятлар молекулалараро ўзаро таъсир спектроскопиясининг бош масаласини беради. Бош масала иккига бўлинади:

1. Спектроскопик экспериментлар натижаларига қараб молекулаларнинг хусусиятлари ҳақида маълумот олиш.

2. Экспериментал натижаларга қараб молекуланинг спектроскопик хусусиятларига таъсири ҳақида маълумотлар олиш мумкин.

Бу масалаларни ечишда молекуланинг ўзига тегишли бўлган спектри эмас, (айланма, тебранма, электрон) балки бу спектрларнинг ўзгариши катта аҳамиятга эга.

Молекулалараро ўзаро таъсир спектроскопиясининг баъзи томонларини кўришдан олдин, молекулалараро ўзаро таъсир кучларини классификация қилиш муҳимдир. Молекулалар орасидаги кучлар асосан иккига бўлинади:

1. Универциал таъсир кучлари.
2. Специфик таъсир кучлар.

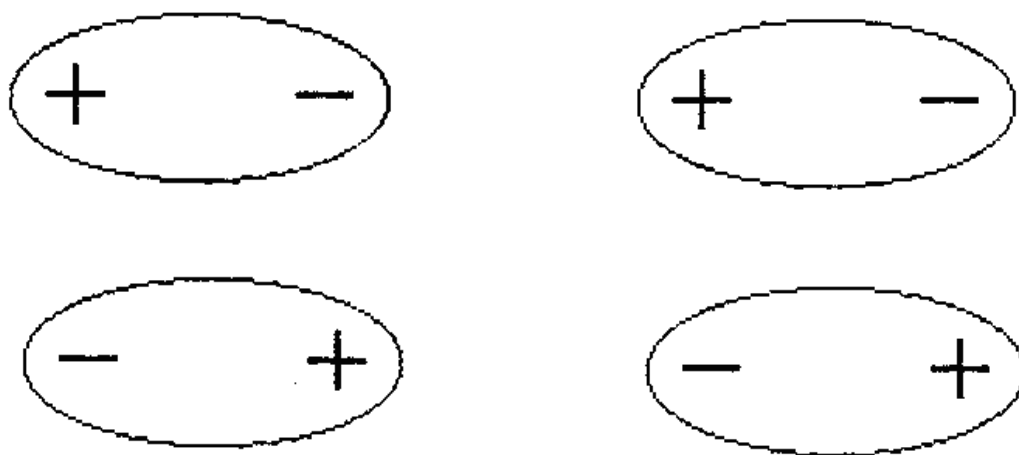
Универциал ўзаро таъсир деганимизда ҳамма ҳолатларда намоён бўладиган кучлар, бу кучларга Ван-дер-вальс кучлари ҳам дейилади [12].

Бу куч табиатини узоқ вақтлар тушунтириш қийин бўлди. Қачонки атомлар орасидаги таъсир кучи табиатини тўлиғича ўрганилганидан сўнг молекулалар орасидаги таъсир кучлари тўғрисида тўлиқ хулосага келиши мумкин. Одатда молекулалараро таъсир кучининг энергияси $0,5 \div 1,5$ кал/моль ташкил этади. Ван-дер-вальс кучлари 3 хил бўлади.

1. Ориентацион куч
2. Индукцион куч
3. Дисперсион куч

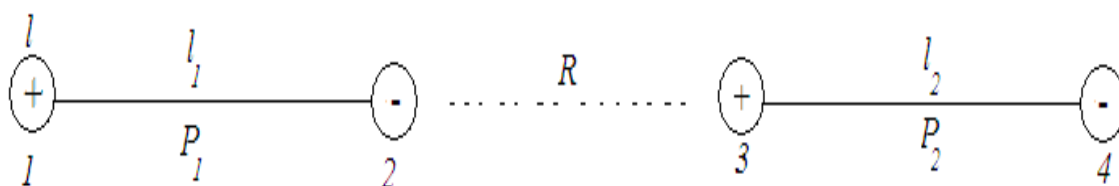
Бу кучлар тўғрисида тўхталиб ўтамиз.

Ориентацион куч. Агар электр майдони $E=0$ бўлганда ҳам дипол моментига эга бўлган молекулага қутбланган молекула дейилади. Бу куч худди шундай доимий дипол моментига эга бўлган молекулалар орасида вужудга келади. Қутбланган молекулалар бир-бирига нисбатан маълум тартибда жойлашади, яъни қарама-қарши ишорали қутбларининг жойланиш тартиби қуйидаги вазиятда бўлади.



1.3-расм. Кутбланган молекула

Натижада қарама – қарши ишорали кутблар орасидаги электростатик куч пайдо бўлади. Шу туфайли молекулалар бир-бирини тортади. Диполлар орасидаги бундай кучга ориентацион куч дейилади. Фараз қилайлик бизга иккита дипол берилган бўлсин.



1.4-расм. Дипол системаси

Бу диполлар орасидаги масофа $R \gg \ell$ қаноатлантурса, бу системанинг умумий таъсир энергияси ҳар бир зарядларнинг таъсир энергияларидан иборатдир, яъни

$$\begin{aligned}
 U &= U_{1,3} + U_{1,4} + U_{2,3} + U_{2,4} = \\
 &= \frac{P_1 P_2}{\ell_1 \ell_2} \left[\frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} - \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 + \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} + \frac{1}{R + \frac{1}{2}(\ell_1 - \ell_2)} \right] \quad (1.15)
 \end{aligned}$$

Агар 1- тенгликда $P_1 = P_2$ ҳамда $\ell_1 = \ell_2$ деб олсак, у ҳолда

$$U = \frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} + \frac{1}{R} \right] = -\frac{P^2}{\ell^2} \left[\frac{2}{R} - \frac{1}{R + \ell} - \frac{1}{R - \ell} \right] \quad (1.16)$$

1.15 ва 1.16 тенгликка оддий математик алмаштиришлар киритиб ва $R \gg \ell$ эканлигини ҳисобга олсак, ориентацион таъсир энергияси қуйидагига тенг бўлади.

$$U_{op} = -\frac{2P^2}{R^3} \quad (1.17)$$

1.17-тенгликни чиқаришда биз молекуланинг иссиқлик ҳаракатини ҳисобга олмадик. Бизга маълумки молекуланинг иссиқлик ҳаракати унинг ориентациясига таъсир этади. Шунга мос равишда унинг ориентацион энергиясига ҳам маълум миқдорда ўзгартириш олиб келади. Шунини ҳисобга олиб ориентацион таъсир энергиясини ҳисоблаб чиқамиз. Бунинг учун кутбланувчанлиги α га тенг бўлган системани майдон кучи E бўлган электр майдонига киритамиз. Бу ҳолда таъсири натижасида системада индукцион диполь моменти P^1 системанинг потенциал энергияси билан қуйидагича боғланган.

$$U = P^1 \cos(P^1 E) \quad (1.18)$$

Дипол майдон томонидан индукциялангани учун унинг йўналиши майдон йўналишига мос тушади.

$$\cos(P^1 E) = 1 \quad (1.19)$$

Бу ҳолда майдон кучланганлигининг қиймати $0 \div E$ га ўзгаради. Натижада ориентацион таъсир энергиясининг қиймати қуйидагига тенг бўлади.

$$U_{op} = -\int_0^E P^1 dE = -\int_0^E \alpha E dE = -\frac{\alpha E^2}{2} \quad (1.20)$$

1.20 - тенгликдаги майдон кучланганлигининг қийматини ҳисобласак бу майдоннинг қиймати $+$ ва $-$ зарядлар ҳосил қилган майдонлар йиғиндисидан иборат бўлади, яъни

$$E = \frac{e}{R^2} - \frac{e}{(R+l)^2} \approx \frac{e}{R^2} - \frac{e}{R^2 + 2Rl} = \frac{2pr}{R^4 + 2R^3l} \quad (1.21)$$

$R \gg \ell$ эътиборга олсак

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

Ориентацион таъсирда қутбланувчанлик ролини ориентация ўйнайди ва унинг қиймати қуйидагига тенгдир.

$$\alpha = \frac{P^2}{3KT} \quad (1.22)$$

1.21 ва 1.22-тенгламаларни 1.21-га қўйсак биз ориентацион таъсир энергиясининг қийматини топган бўламиз.

$$U_{op} = -\frac{\frac{P^2}{3KT} \cdot \frac{4P^2}{R^6}}{2} = -\frac{4P^4}{6KTR^6} = -\frac{2P^4}{3kTR^6} \quad (1.23)$$

Ориентацион таъсир энергиясининг қийматини характерлайди, температура ошиши билан камаяди. 1.23 дан кўринадики ориентацион таъсир энергиясининг қиймати температурага ҳамда R^6 га тескари пропорционал бўлиб, дипол моменти P^2 га тўғри пропорционал.

Агар таъсир этувчи диполларнинг дипол моменти ўзаро тенг бўлмаса, яъни, $P_1 \neq P_2$ лигидан 1.23 қуйидагича бўлади.

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

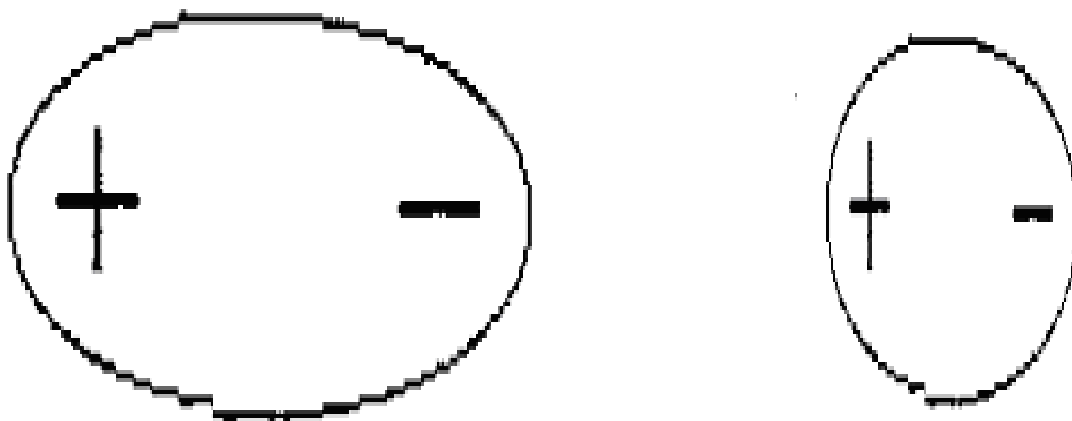
(-) минус ишораси иккита диполнинг ўзаро таъсирини характерлайди.

Индукцион куч. Бир-бирига яқин жойлашган қутбли молекула билан, яъни хусусий дипол моментига эга бўлган молекула билан қутбсиз молекула орасидаги таъсир кучи индукцион куч билан характерланади.

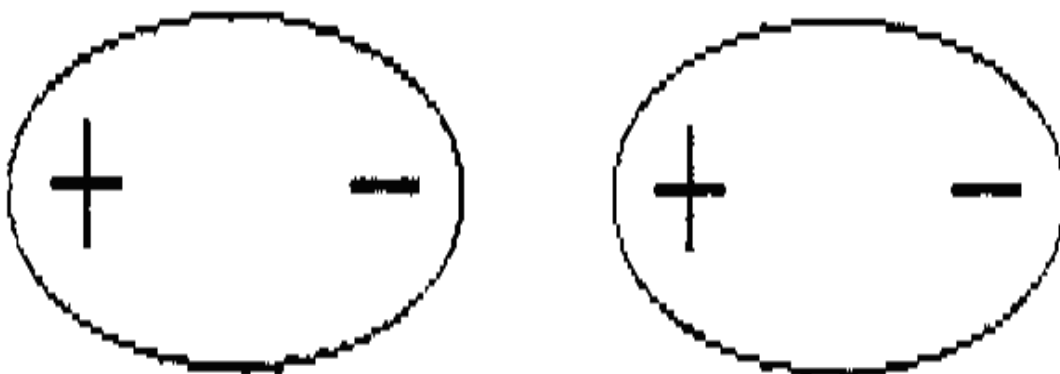
Бундай молекула бир-бирига яқинлашганда қутбсиз молекула қутбли молекула таъсири остида қутбланади. Натижада иккинчи яъни қутбланмаган молекулада индукцион дипол моменти вужудга келади ва индукцион дипол моменти қутбланган молекула билан тортишади. Ҳар бир дипол моментига эга бўлган молекула ўз йўналиши бўйича қўшни дипол моментига эга

бўлмаган молекулаларни индукциялайди. Шунинг учун ҳам индукцион таъсир энергияни қуйидагича ёзиш мумкин.

$$U_{ин} = -\frac{2\alpha P^2}{R^6} \quad (1.24)$$



1.5-расм. Майдон таъсирсиз



1.6-расм. Майдон таъсири остида



1.7-расм. Молекулалар индукцияси

Индукцион кучни биринчи бўлиб Дебай текширган.

Дисперсион куч. Бу куч иккита кутбланмаган молекулалар орасидаги таъсирни характерлайди. Агар бу куч бўлмаганда эди юқори босимда ва паст температурада газларни суюқликка айлантириб бўлмас эди. Бундай куч

табиатини фақатгина квант механикаси асосида тушунтириш мумкин. Бизга квант механикасидан маълумки иккита атом таъсир қилиб молекула ҳосил қиладиган атомларни квант системаси ёки бошқача айтганда атомлардаги электронларнинг мувозанат ҳолатида тебраниши гармоник тебраниш ҳосил қилади деб қараш мумкин, бундай тебраниш ҳосил қилувчи системага осциллятор дейилади.

Атом ва молекулаларнинг ўртача дипол моменти нолга тенг бўлганда электронларнинг тебраниши туфайли ҳосил бўлган осцилляторнинг дипол моментининг аниқ қиймати нолдан фарқли бўлади. Шу туфайли осцилляторлар ўзаро таъсир этишади. Атом ва молекулалардаги вақтнинг маълум бир пайтда вужудга келадиган диполга флуктацион дипол моменти дейилади.

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

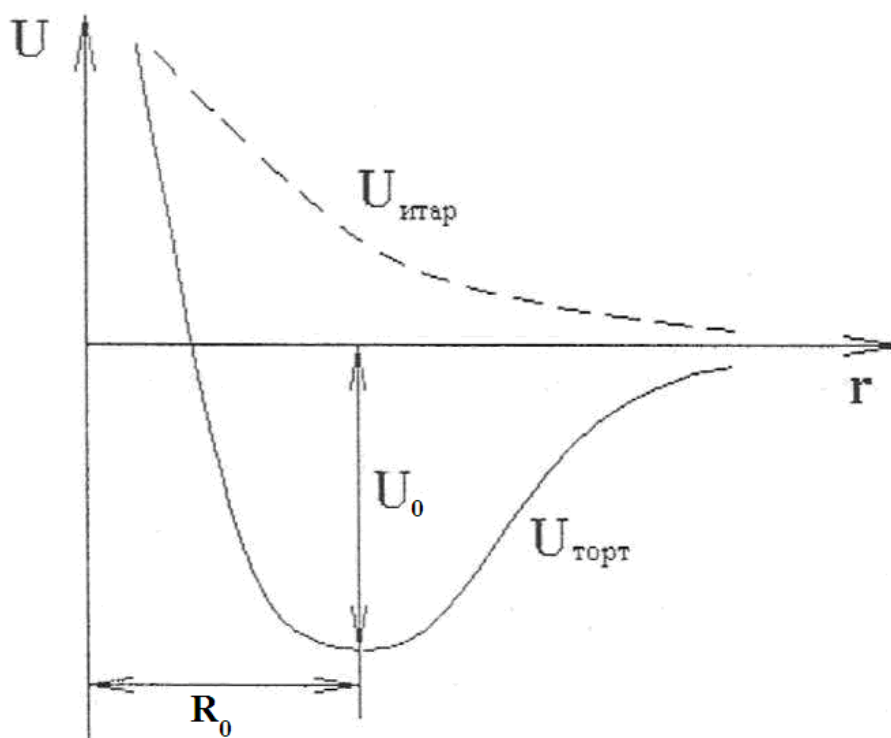
$$U_{um} = \frac{m}{R^{12}}$$

m - итаришиш кучларининг доимийлиги дейилади.

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

$$U = -\left(\frac{n}{R^6}\right) + \left(\frac{m}{R^{12}}\right) \text{ бу формулага Ленард-Джонс формуласи дейилади.}$$

Бу формуланинг графиги қуйидаги кўринишга эга.



1.8-расм. Ленард-Джонс формуласининг график кўриниши

Юқоридаги формулалардан кўринадикки универсиал таъсир кучларининг ҳаммаси масофанинг R^6 даражасига тескари пропорционал. Ориентацион таъсир кучлари температурага ҳам боғлиқ.

Қуйидаги 1.2-жадвалда баъзи моддалар учун ориентацион, индукцион, дисперсион кучларнинг улушлари келтирилган.

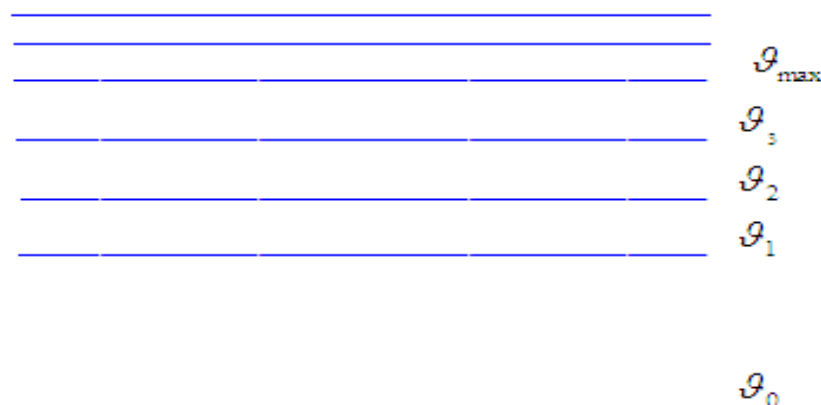
1.2-жадвал [13]

Молекула	Ўзаро таъсир			
	Ориентацион	Индукцион	Дисперсион	μ, D
HCl	18,6	5,4	105	1,03
HBr	6,2	4,05	176	0,78
H ₂ O	190	10	47	1,8
NH ₃	84	10	93	1,5
HI	0,35	1,68	388	0,38

Жадвалдан кўринадики дипол моменти катта бўлган жойда дисперцион ўзаро таъсирнинг улуши кўпроқ бўлади. Специфик кучлар фақатгина баъзи суюқликларга ва баъзи молекулаларга хос бўлган кучлар ҳисобланади.

Энергетик ҳолатлар континуми. Спектроскопик методлар ёрдамида молекулаларнинг энергетик параметрлари ёки валентли боғланишларнинг мустақамлигини аниқлаш катта аҳамиятга эга. Бизга маълумки ангармоник тебранма ҳаракатларга тегишли бўлган спектрал чизиқлар ёки бу чизиқларга тўғри келувчи энергетик ҳолатлар тебраниш квант сони ϑ нинг қиймати ошиб бориши билан энергетик ҳолатлар зичлашиб боради (1.9-расм).

Агар биз эксперимент йўли билан $h\nu_D$ ни топа олсак, ν_D бу $\Delta E=0$ бўлган нуқта ν_D бевосита молекуланинг диссоциация энергиясини характерлайди. Энергетик ҳолатларнинг тутшиб кетган жойига энергетик ҳолатлар континуми дейилади.



1.9-расм. Спектрал чизиқлар энергетик ҳолати

Континум соҳани аниқлаш билан энергиянинг диссоциация соҳасини аниқлаш мумкин. Баъзи ҳолларда континум чегарани топиш унча осон бўлмайди. Бундай вақтда диссоциация энергияси D ни аниқлаш учун қуйидаги формулани билиш шарт.

$$\vartheta^+ = \vartheta_0(1 - 2x)$$

$$\vartheta^+ = \vartheta_0(1 - 3x)$$

$$\vartheta^+ = \vartheta_0(1 - 4x)$$

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

Асосий тон ва обертоларнинг частотаси ҳисобланиб,

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

формуладан диссоация энергиясини ҳисоблаш мумкин. Баъзи ҳолларда абсолют диссоация энергияси эмас, балки нисбий диссоация энергиялари ҳисобланади. Нисбий диссоация энергиясини ҳисоблаш учун таъсир кучларнинг эластиклик доимийлигини K бир-бирига солиштирилади (ёки химиявий боғланишларнинг бир-бирига солиштириш мумкин).

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

K билан орасида алоқадорлик мавжуд.

$$\begin{cases} C - C \\ C = C \\ C \equiv C \end{cases}$$

боғланишлар учун K

$$K_{C-C} : K_{C=C} : K_{C \equiv C} = 1 : 2 : 4$$

Шунинг учун ҳам K нинг қийматини ҳисоблагандан кейин химиявий боғланишлар мустаҳкамли ҳақида маълумот олиш мумкин [13].

1.4. Молекулаларнинг тебранма спектри

Тебранма ҳаракатни ўрганиш пайтида потенциал энергиянинг ядролар орасидаги масофага боғлиқлигини билиш ёки $U(r)$ функциянинг графигини билиш катта аҳамиятга эга. Тебранма ҳаракат пайтида ядроларнинг потенциал энергияси деганда асосан электроннинг тўлиқ энергияси (кинетик, потенциал) катта рол ўйнайди. Молекулаларнинг ташкил топишининг кванто-механик ҳисоблашлари шуни кўрсатадики $U(r)$ функция $r=r_e$ нуктада минимал қийматга эга шу боисидан $U(r)$ ни $r-r_e=q$ деб олиб қаторга ёйишимиз мумкин.

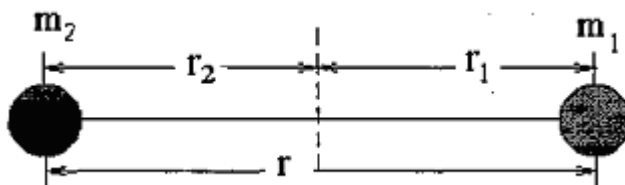
$\Delta j = \pm 1$

$$U(r) = U(r_e) + \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_e} (r-r_e) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_e} (r-r_e)^2 + \dots \quad (1.25)$$

$r=r_e$ нуктада - $\frac{dU}{dr} = 0$ бўлади. $\left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_e} = k$ деб белгилаймиз.

$$U(r-r_e) = k \frac{(r-r_e)^2}{2} = \frac{1}{2} k q^2 \quad (1.26)$$

Иккинчидан кўринадики кичик тебранишлар пайтида $U(r)$ ни парабола деб яъни 2 атомли молекуланинг кичик тебранишларини гармоник тебранма ҳаракат деб қабул қилса бўлади. Умуман 2 атомли молекуланинг тебранишларини текширганда гармоник осциллятор моделидан фойдаланиш мумкин. Ҳар қандай 2 атомли молекула гармоник осциллятор деб қабул қилса бўлади (1.10-расм).



1.10-расм. 2 атомли молекула гармоник осциллятор модели сифатида

$$r_1 + r_2 = r$$

1.10- расмда келтирилган заррачаларни тортиб турувчи кучларни топиш учун 2-тенгламадан ҳосила олиш керак

$$F = \frac{dU(r-r_e)}{dr} = -k(r-r_e) \quad (1.27)$$

к-га квазиэластиклик доимийлиги дейилади.

Агар. $r_1 + r_2 = r$ ва ҳамда $m_1 r_1 + m_2 r_2$ десак у вақтда ҳар бир заррачанинг тебранишини ҳарактерлайдиган кучни қуйидаги дифференциал кўринишда ёзиш мумкин

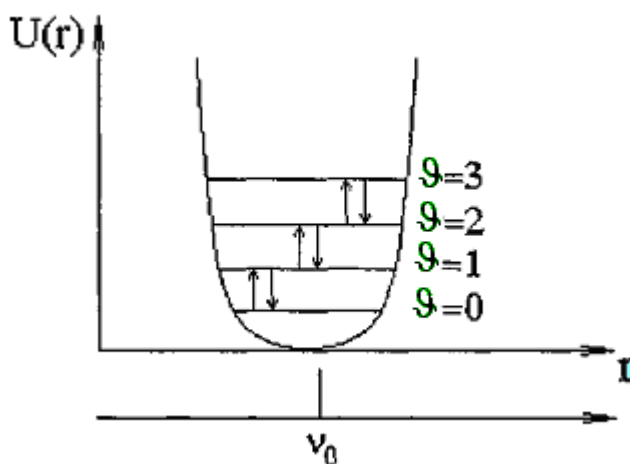
$$\begin{aligned} m_1 \ddot{r}_1 &= -k(r-r_e) \\ m_2 \ddot{r}_2 &= -k(r-r_e) \end{aligned}$$

Буларнинг ҳаммасидан кўринадики, гармоник осцилляторнинг частотаси

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

бу формула гармоник осциллятор хусусий частотасини аниқлайди. Қачонки бу гармоник осциллятор потенциал энергиясини (1.25) чи билан ифодаласа, гармоник осцилляторнинг энергияси квантланган бўлади. У қуйидагича аниқланади.

$$E_{\text{кол}} = \left(\mathcal{Q} + \frac{1}{2}\right) h \nu_0 \quad (1.28)$$



1.11-расм. Гармоник осциллятор энергияси

9-тебранма квант сони. 0, 1, 2, 3 қиймат олиши мумкин.

1.27-чи ифодадан кўринадикки, тебранма энергетик ҳолатлар тенг масофада жойлашади.

Графикдаги ҳар бир ҳолат орасидаги масофа $h\nu_0$ га тенг. Реал молекуланинг тебранишлари гармоник осцилляторнинг тебранишларидан кескин фарк қилади. Реал молекуланинг тебранишлари ангармоник тебранишлардир.

Тебранма ҳолатлар орасида ўтишлар танлаш қоидасига асосан $\Delta g = \pm 1$ бўлади; бундан кўринадикки, гармоник осцилляторнинг спектри битта чизикдан ν_0 дан иборат бўлади (1.11-расм).

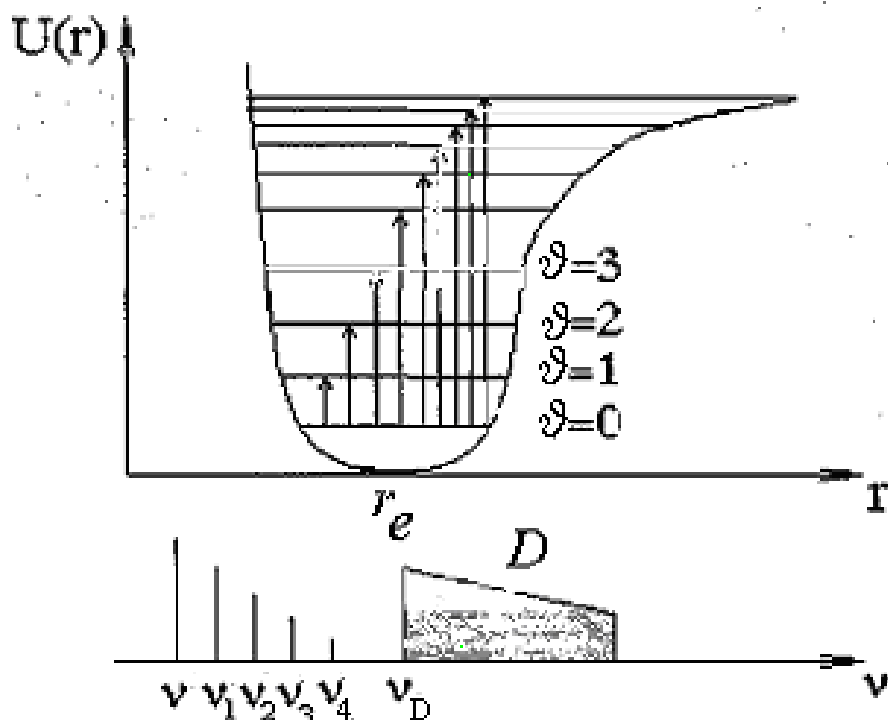
Катта амплитудали тебранишларда тебранишларни гармоник осцилятор сифатида қараш мумкин эмас. Ангармоник тебранишларни ифодалаш учун бир нечта тенгламалар топилган. Асосийси **Морзе** тенгламасидир (1.29)

$$U(q) = D(1 - e^{-a(r-r_e)^2}) \quad (1.29)$$

a -потенциал эгрилигини характерлайдиган катталик. Бу тенгламада $r \rightarrow \infty$ интилса $U(q) = U(r-r_e) \rightarrow D$ интилади.

Яъни катта амплитудали тебранишлар пайтида молекула диссоциацияланиши мумкин. Ангармоник осцилляторнинг спектри гармоник осцилляторнинг спектрига қараганда анча мураккаб бўлади. Хусусий ҳолда Морзе формуласини

$$U(r - r_e) = Da^2(r - r_e)^2 \quad (1.30)$$



1.12-расм. Ангармоник тебранишларнинг потенциал эгрилиги

1.30-чи формула 1.25-чи формула билан мос келади, яъни Морзе тенгламасидан гармоник тебранма ҳаракат тенгламасини ҳосил қиламиз.

Экспериментал текширишлар шуни кўрсатадики квазиэластик катталиқ K билан D диссоциация энергияси орасида боғланиш мавжуд. $K=2Da^2$

Қуйидаги 1.3-жадвалда шу боғланишни ифодаловчи баъзи маълумотлар келтирилган. α -доимий сон бўлиб $U(r)$ функциянинг кўринишига боғлиқ бўлади. Гармоник осциллятор бўлса $\alpha = 1$ бўлади.

1.3-жадвал [14]

Молекула	$D, \text{к кал/мол}$	$K:10^{-2}, \text{Н/м}$
HF	145	8,65
HCl	102	4,47
HBr	87,5	3,78
HJ	71,5	2,89

$$v_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{M}} \quad \hat{a}a \quad k = 2Da^2$$

буларни солиштириб қуйидаги ифодани ёзишимиз мумкин.

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

1.12-расмдаги $\vartheta=0 \rightarrow \vartheta=1$ ўтиш пайтидаги ҳосил бўлган спектрал чизиқга асосий чизиқ дейилади ёки фундаментал ўтишлар ҳам дейилади. Частотаси v_0 дан $\vartheta=0$ ϑ нинг бошқа қийматларига ўтишлардан ҳосил бўлган спектрал чизиқларга обертонлар дейилади. Обертонларнинг частотаси

$$\begin{aligned} v &= v_0(1 - 2x) \\ v &= 2v_0(1 - 3x) \\ v &= 3v_0(1 - 4x) \\ x &= \frac{hv_0}{4D} \end{aligned}$$

Обертонлар интенсивлиги жиҳатдан асосий тондан 4 марта кичик бўлади.

$$v_{g^2 \rightarrow g^2} = \frac{1}{h} (E_{g^2} - E_{g^2})$$

Ангармоник осциллятор учун тўлиқ энергия

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

Хулоса қилиб айтганда молекулаларнинг тебранма ҳаракатлари туфайли ҳосил бўладиган спектрларини кўриниши жуда мураккаб. Шу билан биргаликда суяқликлардан каттиқ жисмлардан тўлиқ информация олиш мумкин [14].

Икки атомли молекулаларнинг тебранма айланма спектрлари: Бизга маълумки молекулада асосан уч хил ҳаракатни кузатиш мумкин. Айланма, тебранма ва электрон. Бу ҳаракатларнинг содир бўлиши учун керак бўладиган энергиялар бир-биридан фарқ қилади.

$$E_{эл} > E_{теб} > E_{айл}$$

икки атомли молекулаларга тегишли бўлган тебранма ҳаракатларни кўриб ўтдик, яъни айланма ҳаракатларни ҳисобга олмадик.

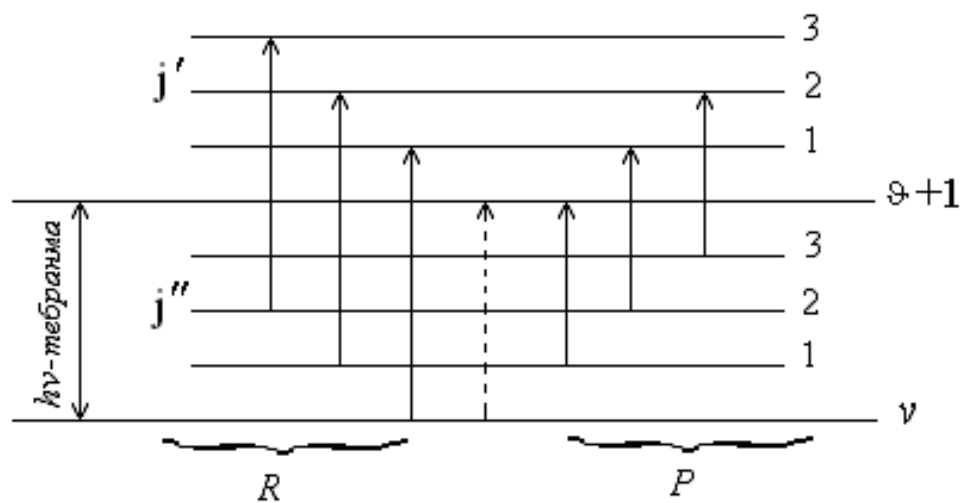
Ҳақиқатдан тебранма ҳаракатлар пайдо бўлган жойда айланма ҳаракатлар пайдо бўлади. Икки атомли молекуланинг тебранма ҳаракатини текшираётганда айланишга ва тебранишга тегишли бўлган энергияни идеал ҳолатда қаттиқ ротатор ва гармоник осциллятор энергияларини йиғиндисидан иборат деб қараш мумкин яъни

$$E_{j\vartheta} = h\nu_0 \left(\vartheta + \frac{1}{2} \right) + \frac{h^2}{8\pi^2 I} j(j+1)$$

j - айланиш ҳолатга тегишли квант сон,

ϑ -тебранма ҳолатга тегишли квант сонлари

Қуйидаги 1.13-расмда тебранма ва айланма ҳолатларга тегишли бўлган ўтишлар кўрсатилган.



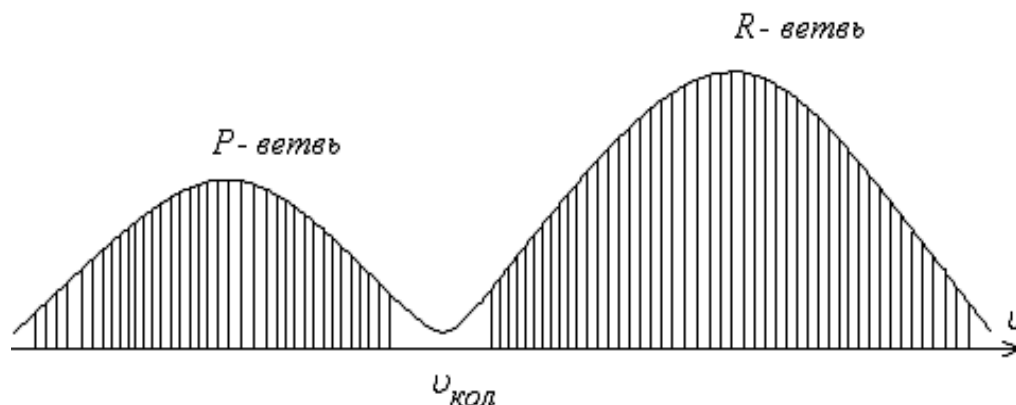
1.13-расм. Тебранма ва айланма ҳолатларга тегишли бўлган ўтишлар

$\vartheta = 0 \rightarrow \vartheta = 1$ ҳолатлар орасидаги ўтишлар бўлаётган бўлсин. Айланиш квант сони учун танлаш принципи $\Delta j = \pm 1$ га асосан икки ҳаракат бўлиши мумкин. $\Delta j = +1$ ҳаракат ёки $\Delta j = -1$ ҳаракат.

$\Delta j = +1$ қийматига тўғри келувчи чизиқлар дастасига R-шоҳ дейилади.

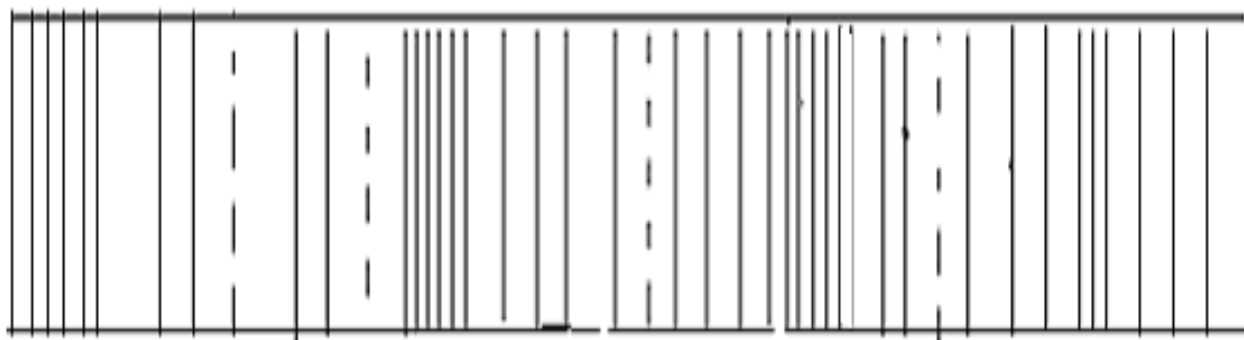
$\Delta j = -1$ қийматига тўғри келувчи чизиқлар дастасига P- шоҳ дейилади.

R ва P – шохларнинг частоталари бир бирдан фарқ қилади. Қуйидаги расмда R ва P шохларнинг спектрини кўриниши келтирилган.



1.14-расм. R ва P шохларнинг спектри

R ва P – шохлар асосан сийраклаштирилган газларда яхши кузатилади. Баъзи суюқликлар ва эритмаларда ташқи шароитнинг маълум қийматларида (P ва T) R ва P шохлар ўрнига Q шох кузатилади. Бу суюқликлар ва эритмаларнинг тоза тебранма ҳаракатига тўғри келади. Тебранма спектрлар айланма спектрларга қараганда, яқин инфрақизил соҳада жойлашади ва спектрал чизиқлари йўл-йўл кўринишга эга бўлади.



1.15-расм. Тебранма спектрал чизиқлари

Яъни реал молекулаларнинг айланма ва тебранма ҳаракатлари бир бировига таъсир этади. Шу таъсир туфайли айланиш доимийси V_9 ва ҳамда диссоация энергияси D_9 ўзгарувчан қиймат қабул қилади ва бу ўзгариш маълум қонуният асосида бўлади. Айланма ва тебранма ҳаракатларнинг

ўзаро таъсирини ҳисобга олганда айланиш ва тебраниш энергиясини қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин.

$$E_{\text{айл-теб}} = h\nu_{\text{теб}} \left(g + \frac{1}{2} \right) - h\nu_{\text{теб}} \left(g + \frac{1}{2} \right)^2 + hB_g j(j+1) - hD_g j^2(j+1)^2$$

B_g - нинг ўзгариш қонуни яъни

$$\hat{A}_g = \hat{A}_0 - \alpha \left(g + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

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

Бу формуладан $D_g=0$ деб, катта амплитудали тебранишларни ҳисобга олсак

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

$\Delta j = +1$ да, яъни чизиқнинг частотаси

$$\nu_{+1} = \nu_{\text{о'а'а}} + 2B_g(j+1);$$

$$\Delta j = -1 \text{ да } \nu_{-1} = \nu_{\text{о'а'а}} - 2B_g j$$

Қуйидаги 1.4-жадвалда j нинг ҳар хил қийматларида R ҳамда P шохларга тегишли бўлган чизиқларнинг частотаси келтирилган.

1.4-жадвал [15]

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

1.4-жадвалдан кўринадикки айланма-тебранма спектрлар группаси орасидаги масофа $\Delta\nu = 2B_0$ тенг.

Морзи формуласи $U(q) = D_9 [1 - e^{-a(r-r_e)}]^2$ нинг хусусий ҳоллари

1) $r \rightarrow \infty$ да $U(q) \rightarrow D_9$ да бу формуланинг 2- хусусий ҳоли

2) $r=r_e$ $U(q)=0$ бўлади.

Молекуланинг тебранма айланма ҳаракатларини биргаликда қараш пайтида айланиш доимийлиги.

$B = \frac{h^2}{8\pi^2 J c}$ ўзгариб туриш туфайли унинг ўртача қийматини олиш

керак.

$$B = \frac{h^2}{8\pi^2 J c} = \frac{h^2}{8\pi^2 m r^2}$$

I-боб бўйича хулоса

Биринчи бобда ёруғликнинг муҳитлардан сочилишининг физик асослари ўрганилди. Ёруғликнинг муҳитлардан сочилишига асосий сабаб зичлик флуктуацияси эканлиги, муҳитларда ёруғликнинг сочилишини физик асосларини Смолуховский ғояси асосида назарий равишда А.Эйнштейн тушунтирганлиги, сочилган ёруғлик интенсивлиги муҳитга тушадиган ёруғлик тўлқин узунлигининг тўртинчи даражасига тескари пропорционаллиги ва ҳақозолар ўрганилди.

Ҳозирги кунда молекулаларни тадқиқ этишда комбинацион сочилиш спектрлари (КСС) муҳим ўрин тутиши ва унинг квант, мумтоз назариялари ўрганилди. Чунки комбинацион сочилиш спектри ҳар бир модданинг шахсий оптик характеристикаси ҳисобланади.

Молекулалараро ўзаро таъсир кучлари асоси ҳамда бу кучларни қандай турлари мавжуд эканлиги ўрганилди.

II-Боб. Тажриба техникаси ва методикаси

2.1. Комбинацион сочилиш спектрини қайд қилувчи спектрометрлар ва уларнинг оптик тузилиши

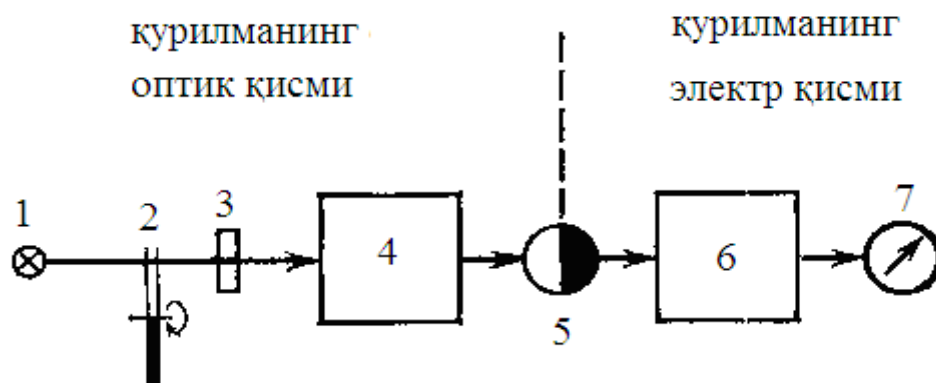
Спектрометр (лотинчадан *spectrum* ва *spectare* — қарамоқ ва метр грекчадан *μέτρον* —ўлчов, ўлчамоқ маъносини билдиради) — оптик асбоб бўлиб, спектроскопик тадқиқотларда спектрларни йиғишда, қайта ишлашда ва турли хил аналитик усуллар ёрдамида таҳлил қилишда фойдаланилади. Тадқиқ қилинаётган модда нурланиш манбалари (рентген, лазер ва чақнаш) таъсирида флуоресценциялантирилиб, керакли спектри таҳлил қилинади. Одатда нурланишларнинг интенсивлиги ва энергияси, частотаси, тўлқин узунликлари ўлчанади, шунингдек бошқа характеристикалари яъни кутбланиш даражасини ҳам аниқлаш мумкин. Спектрометр терминини тўлқин узунликларнинг кенг интервалида гамма нурланишлардан то инфрақизил нурланишларгача соҳада ишлайдиган қурилмаларга нисбатан ишлатилади. Спектрларни қайд қилишда ярим ўтказгичли детекторлар, сцинтилляцион ҳисоблагичлар ҳамда чизикли ёки матрицали ПЗС базали детекторлардан фойдаланилади. Спектрометрлар бир биридан спектрал соҳаси, сезгирлиги ва оптик тузилишига кўра фарқланади. Замонавий спектрометрлар асосан дифракцион панжарали бўлиб, ажрата олиш қобилияти юқори [16].

Спектрометрларнинг қуйидаги типлари мавжуд:

- Комбинацион сочилиш спектрини қайд қилувчи спектрометрлар
- Рентгенфлуоресценцияловчи спектрометр
- Учқунли оптик-эмисион спектрометр
- лазерли спектрометр
- Инфрақизил спектрометр
- Индуктив- боғланган плазмали спектрометр

- Атомли-абсорбцион спектрометр
- Масс спектрометр
- Спектрогониметр

Юқори ажрата олиш қобилиятига эга бўлган спектрометрлар атом ва молекулалар тузилишини тадқиқ қилишда 2.1-расмда келтирилган схема асосида ишлайдиган стационар лаборатория қурилмаларига эга бўлиши керак. Фокус масофаси 6 метргача етадиган монохраматорлари вакуумли корпусга жойлаштирилади, чунки монохраматорлар атмосферадаги ютилишлардан ҳоли бўлиши шарт. Шунингдек силкинишлардан химояланган ва ҳароати ўзгармайдиган термостабил ҳолатда жойлаштирилиши керак. Бу қурилмаларда катта эшелетли, икки ва тўрт каррали дифракция, юқори сезгирликли совутиш қурилмалари мавжудлигидан, ютилиш спектрининг қийматини $R = 2 \cdot 10^5$ тўлқин узунлигининг $\lambda = 3$ мкм қийматида ҳам аниқлай олади. Жуда нозик тузилмаларда схемага Фабри — Перо интерферометри ҳам қўшилади.



2.1-расм. Бир нурли бир каналли спектрал қурилманинг блок-схемаси. 1- нурланиш манбаи; 2- оптик модулятор (обтюратор); 3- ўрганилаётган модда; 4-сканерловчи фильтр (монохраматор); 5-нурланишларни фотоэлектрик қабул қилгич; 6-кучайтиргич ва қабул қилгич сигналларини ўзгартиргич; 7-аналог ёки рақамли қайд қилгич:

Замонавий комбинацион сочилиш спектрометрлари ажрата олиш қобилиятининг юқорилиги, ўлчамининг кичиклиги, массасининг енгиллиги, фойдаланиш учун қулайлиги билан ажралиб туради (2.2-расм).



2.2-расм. Замонавий комбинацион сочилиш спектрометрнинг ташқи кўриниши

Спектрометр Almega XR: Алмега XR спектрометри юқори эффеќти дисперцияли комбинацион сочилиш (КС) спектрометри ёрдамида молекуланинг тебранма спектри асосида молекула тузилиши хаќида маълумот олиш мумкин. Раман спектри орќали органик ва ноорганик бирикмаларни миќдорий ўрганиш ва идентификациялаш мумкин, молекула тузилишидаги жуда кичик ўзгаришларга ҳам сезгир. Алмега спектрометри минералогияда, фармацевтика, криминалистикада ва ярим ўтказгичлар саноатида кенг ишлатилади. Спектрометр микро ва макро ҳажмли каттиқ ва суюқ намуналарни таҳлил қилиши мумкин. Таҳлилни шиша ёки пластикли кадоқларни очмасдан ҳам ўтказиш мумкин. Бундан ташқари Алмега спектрометри орќали сувли аралашмаларни ҳамда оптик толали датчиклар орќали масофадан туриб таҳлил ўтказиш ҳам мумкин.

Алмегага ўрнатилган микроскоп асбобнинг сезгирлигини юқори даражада бўлишини таъминлайди. Микроскопни асбобга ўрнатишда оптик толалар ишлатилмайди. Бу ёруғлик ўтказишни ва сезгирликни оширади. Бундан ташқари фокуслаш жараёнида намунадаги доғни кичик бўлишига

флуоренценцияни таъсирини камайтиради. Алмега XR спектрометрининг асосий хусусиятлари қуйидагилардан иборат:

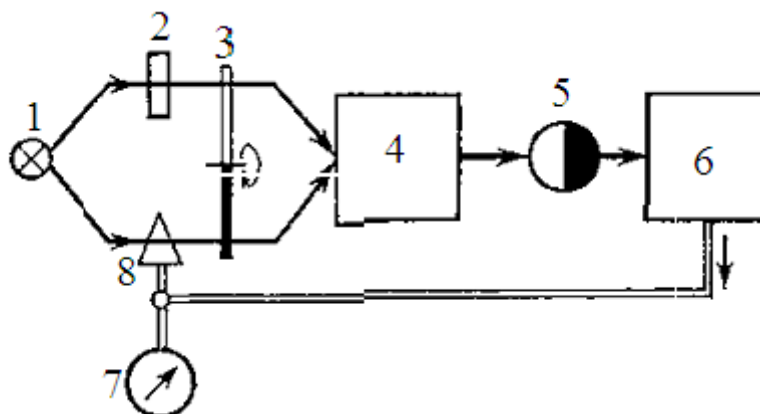
- Дифракцион панжара билан чегараланган фазовий ажратиш
- Чуқур сатҳларни кузатиш
- Автоматик режимда қутбланган ўлчашларни амалга ошириш
- Қутбланмаган чизикларни ўлчаш
- Асбоблар столида: механик 2" x 3" , моторли 3" x 4" ва 300 мм қалинликдаги ярим ўтказгичларни тадқиқ қилиш учун асбобларни танлаш мумкин
- Микропланшетлар учун адаптер
- Асбоб функциясини етарли даражада бажаришини автоматик бошқариш



2.3-расм. Юқори эффективли дисперсион комбинацион сочилиш спектрометрининг ташқи кўриниши

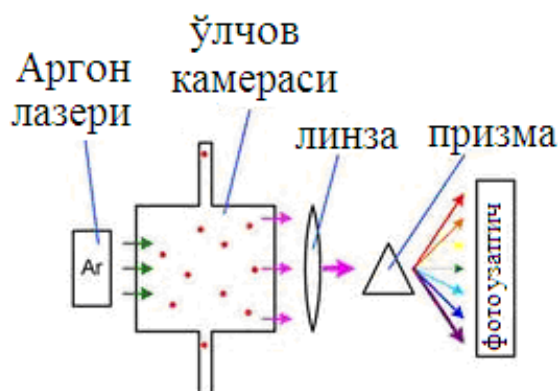
Комбинацион сочилиш спектрометрлари бир ёки икки нурли бўлиши мумкин. Одатда нурланиш манбаи бўлиб лазерлар ишлатилади. Бирламчи нурланишнинг комбинацион частотасини ва фон нурланиш босимини кузатишда иккиланган ёки учланган монохроматорлардан, шунингдек голографик дифракцион панжаралар ишлатилади. Қурилма суюқликларда, кристалларда ва кукунларда турли бурчаклар ва турли ёритилганликда юз

берадиган комбинацион сочилишни кузатиш асбоблари билан жиҳозланади. Энг яхши спектрал қурилмаларда фоннинг фойдали сигналга нисбати 10^{-15} ва уйғотилган чизиқдан бир неча $см^{-1}$ масофадаги комбинацион сочилиш частотасини аниқлаш имкониятига эга.



2.4-расм. Икки нурли бир каналли спектрометрнинг “оптик ноль” схемаси. 1- нурланиш манбаи; 2- оптик модулятор (обтюратор);3- ўрганилаётган модда;4-сканерловчи фильтр (монохраматор);5-нурланишларни фотоэлектрик қабул қилгич;6-кучайтиргич ва қабул қилгич сигналларини ўзгартиргич; 7-аналог ёки рақамли қайд қилгич;8-оптик клин:

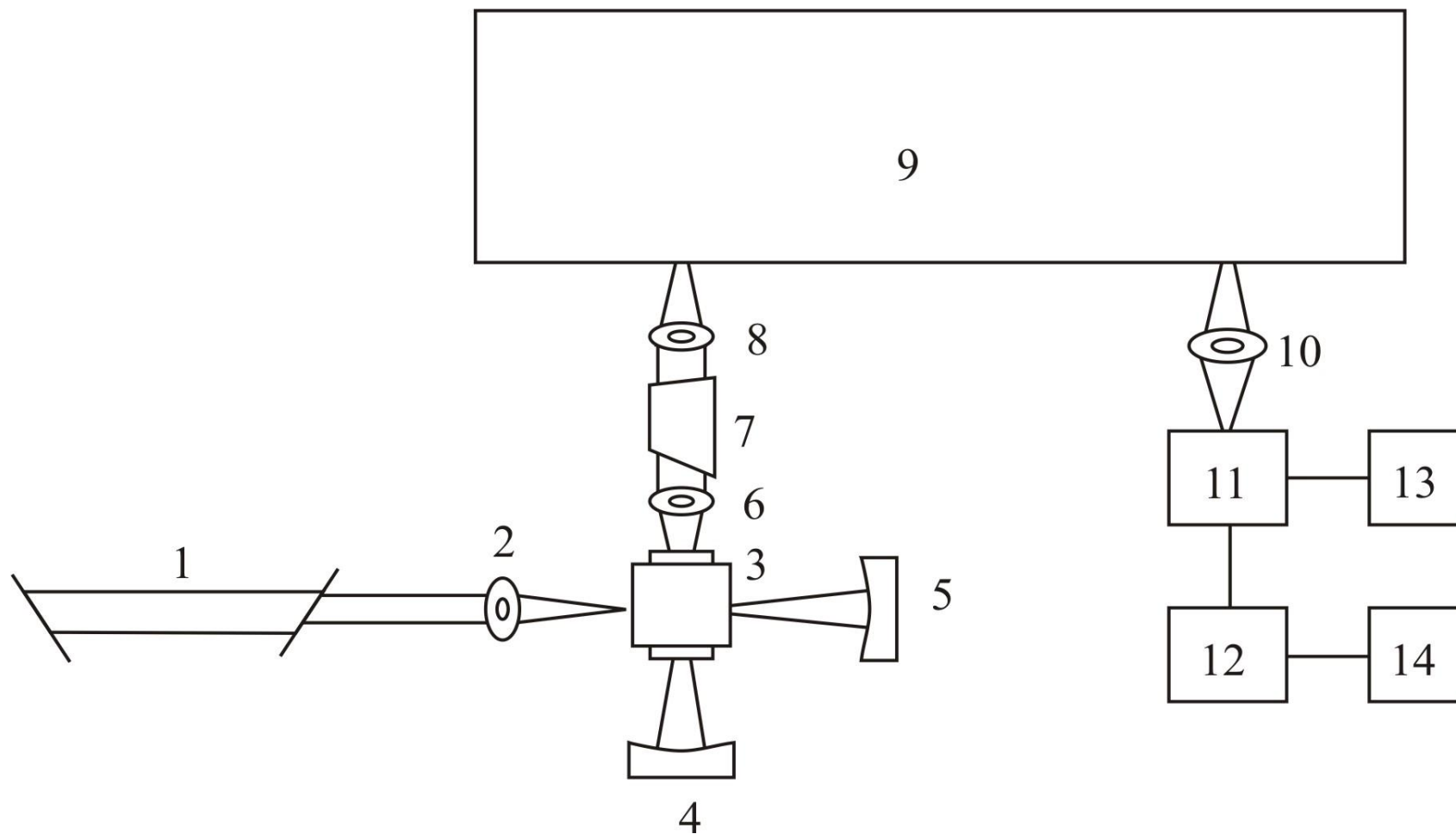
ДФС-52 спектрометри лазер манбаи ёрдамида ёритилган суюқ, кристалл, поликристалл моддаларда комбинацион сочилиш спектрини олиш ва қайд қилиш учун мўлжалланган. Шунингдек, бу спектрометр молекуляр спектроскопия соҳасида физика-химиявий текширишлар, яъни суюқликлар (лойқа), сув аралашмалари, кристаллар, плёнкалар ва буюқлар таркиби ва тузилишини ўрганади [16].



2.5-расм. Уйғотиш манбаи аргон лазери бўлган спектрометр оптик схемаси

ДФС-24 спектрометри ва унинг ишлаш усули: Комбинацион сочилиш спектрини қайд қилиш СамДУ оптика ва спектроскопия кафедрасида тузилган қурилмада кўриб чиқилган. У юқори босимли термостатли кювета ДФС-24 серияли монохраматорлар асосида ташкил топган спектрометрдан иборат. Қурилманинг блок схемаси 2.6 – расмда тасвирланган.

Тажриба қурилмасининг асосий элементлари, характеристикаларини кўриб ўтаемиз. 488 нм тўлқин узунликдаги қуввати $0.1 \div 0.3$ Вт бўлган ЛГП-502 ва ЛГП-100 м 1-типтаги аргон лазери комбинацион сочилиш спектрини уйғотувчи ёруғлик манбаи сифатида қўлланилди. 2.5-расмдан кўриниб турибдики (1) лазердан чиқадиган ёруғлик (2) линза орқали намунага фокусланади. Сферик кўзгу (4) монохраматор тирқишига йиғилган сочилган нурланишнинг ёруғлик оқимини кўпайтиради. Намунадан ўтган лазер нури сферик кўзгу (5) орқали тескари томонга йўналади ва йўқотилган нурланишнинг қувватини ошириб намунанинг марказида фокусланади. 90° бурчак остида сочилган ёруғлик (6) ва (8) линзалар ёрдамида монохраматорнинг кириш тирқишида йиғилади. Бу линзалар орасида бурама призма (7) жойлашган. У лазер нурини 90° га буради. Монохраматор (9) дан кейин ёруғлик линза (10) га тушиб, электронли импульс режимида ишлайдиган фотоэлектрон кучайтиргич (ФЭУ-106) (11) га фокусланади. Қайд қилиш системаси аналог чиқишга эга бўлган ИПФ-2Л импульсли ҳисоблагич (12) кўринишида бўлади. Спектр КСП-4 (14) ўзи юрар асбобда қайд қилинади [17].



2.6 -расм. ДФС-24 тажриба қурилмасининг блок схемаси. 1-аргон лазери, 2-6-8-10-линзалар, 3-намунавий кювета, 4-5-сферик кўзгулар, 7-бурама призма, 9-монохроматирлар, 11-фотоэлектрон кучайтиргич Ф.Э.У-10в, 12-интенсиметр ИПФ-2Л, 13-таъминлаш блоки ФЭУВС-22, 14-ўзи ёзар КСП-4

2.2. Юқори босимли кювета-термостат

Газ ва суюқликларнинг юқори босимда температуранинг кенг интервалида комбинацион сочилиш спектрини тадқиқ қилиш учун махсус кювета термостат тайёрланган. Температуранинг $80 \div 360$ К соҳасида ишлайдиган оптик юқори босимли термостатнинг схемаси (2.7-расм)да келтирилган.

Оптик термостатда юқори босимли кювета (1) қобик (2) билан ўралган, у орқали иссиқлик ташувчи ўтади. Ҳаммаси биргаликда термоизоляцияни таъминлайдиган вакуумли ташқи қобик (3) ичига жойлашган. Юқори босимли кювета бир-бирига 90° бурчак остида цилиндр тагликка маҳкамланган металл цилиндрдан ташкил топган. Цилиндр текисликда лазер нурларини (4) ва сочилган нурланишни (5) ўтказувчи тирқишлар герметик жойлаштирилган. Шунингдек кюветада ишчи моддаларни киритиш учун мўлжалланган 2 та найи (6) мавжуд бўлиб. У металл трубадан тайёрланган бўлиб, корпуснинг юқори ва пастки қисмига кавшарланган. Битта киритиш найидан “Мис-Константин” термопара қўйилади ва намуна билан бевосита алоқада бўлади.

Кюветани ўраб турган қобик (2) тирқиш ва каналлардан иборат туташтирувчи системага эга бўлиб, улар иссиқлик ташувчини киритишга мослаштирилган ҳолда, кюветанинг пастки ва юқори қисмларида жойлашган. Шу киритиш жойидан иссиқлик ташувчи юқоридан пастга боради. Намунани совутиш учун Дьюар идишидан суюқ азот киритиш найидан юборилади. Суюқ азотнинг ҳаракатланиш тезлигини бошқариб, совуқ температура бир хилда сақланади. Намунани қизитишда эса ультратермостатдан иссиқ сув жўнатиш орқали амалга оширилади. Спектрни қайд қилиш давомида температуранинг бир хилда сақлаш тажриба натижасини аниқлигини оширади.

Лазер нури намунадан 2 хил горизонтал ва вертикал ҳолда термостатдан ўтказиш мумкин.

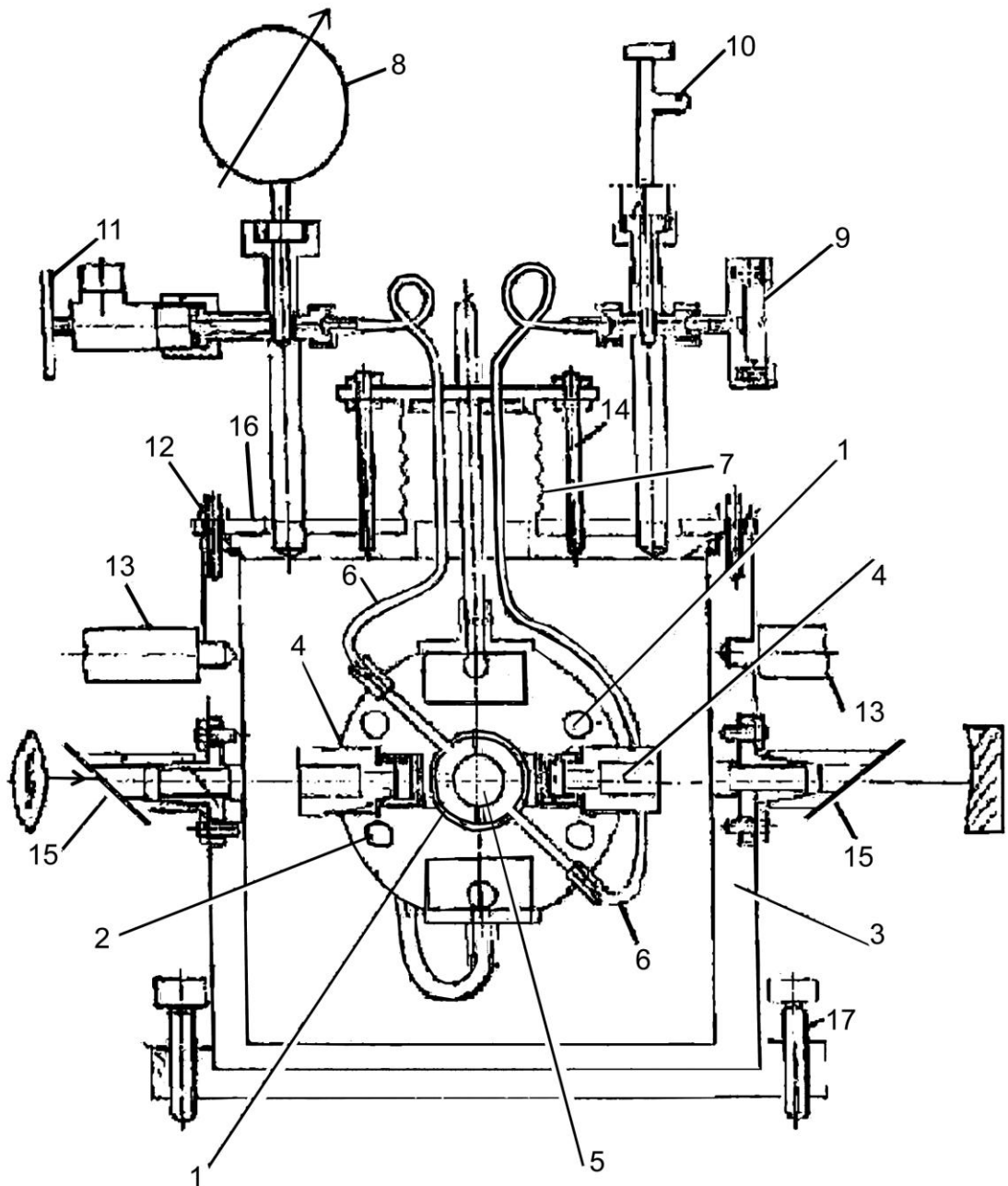
Вакуумли идиш ичидаги кювета сиффон (7) га осилиб турибди, сиффон ёрдамида кюветани асбоб ўқиға ва лазер нури йўналишига мослаштириш мумкин. Термостат қулай конструкцияга эга, унинг қопқоғига (16) манометр (8) қотирилган, термопарани (9) герметик киритувчи мослама кюветани жойлашиш вазиятини бошқарадиган сиффон (7) моддани киритиш ва чиқаришга мослашган винтлардан (10, II) иборат. Қопқоқ ташқи идишга (3) резина қатлам (12) ёрдамида герметик зичланади. Шунингдек ташқи идишга термостатни кўтариш учун мўлжалланган тутқичлар (13) ҳам маҳкамланади. Ташқи қобикдаги вакуумни текширувчи манометрик лампа кюветани ташқи қобик ва тирқишларга нисбатан жойлашиш вазиятини тўғриловчи болтлар (14). Лазер нурланиши ўтказадиган тирқиш (15) Брюстер бурчаги остида жойлаштирилган. Ташқи қобикнинг асбоб ўқиға нисбатан жойлашишини болтлар (17) таъминлайди.

Тоза ҳолдаги газларнинг аниқ температура ва босимдаги зичлигини маълумотномадан олиш мумкин. Тадқиқ қилинадиган газ босимини керакли ҳолатга келтириш учун унга буфер газни аралаштирамиз. Манометрдан аралашма газнинг босимини қайд қиламиз. Буфер газ босими

$$P_2 \approx P_{ap} - P_1$$

муносабатдан аниқланади. Кейин маълумотномадан P_2 босимга мос келувчи буфер газнинг зичлигини аниқлаймиз. Зичлик (0.5-1) Амага аниқликда ўлчанди.

Тадқиқ қилинадиган газнинг тозаллигини спектроскопик текшираамиз. Метан анча содда газ бўлганлигидан, тажриба объекти сифатида ҳеч қандай қийинчилик туғдирмади. Спектрал чизикларида ортиқча чизиклар кузатилмади [18].

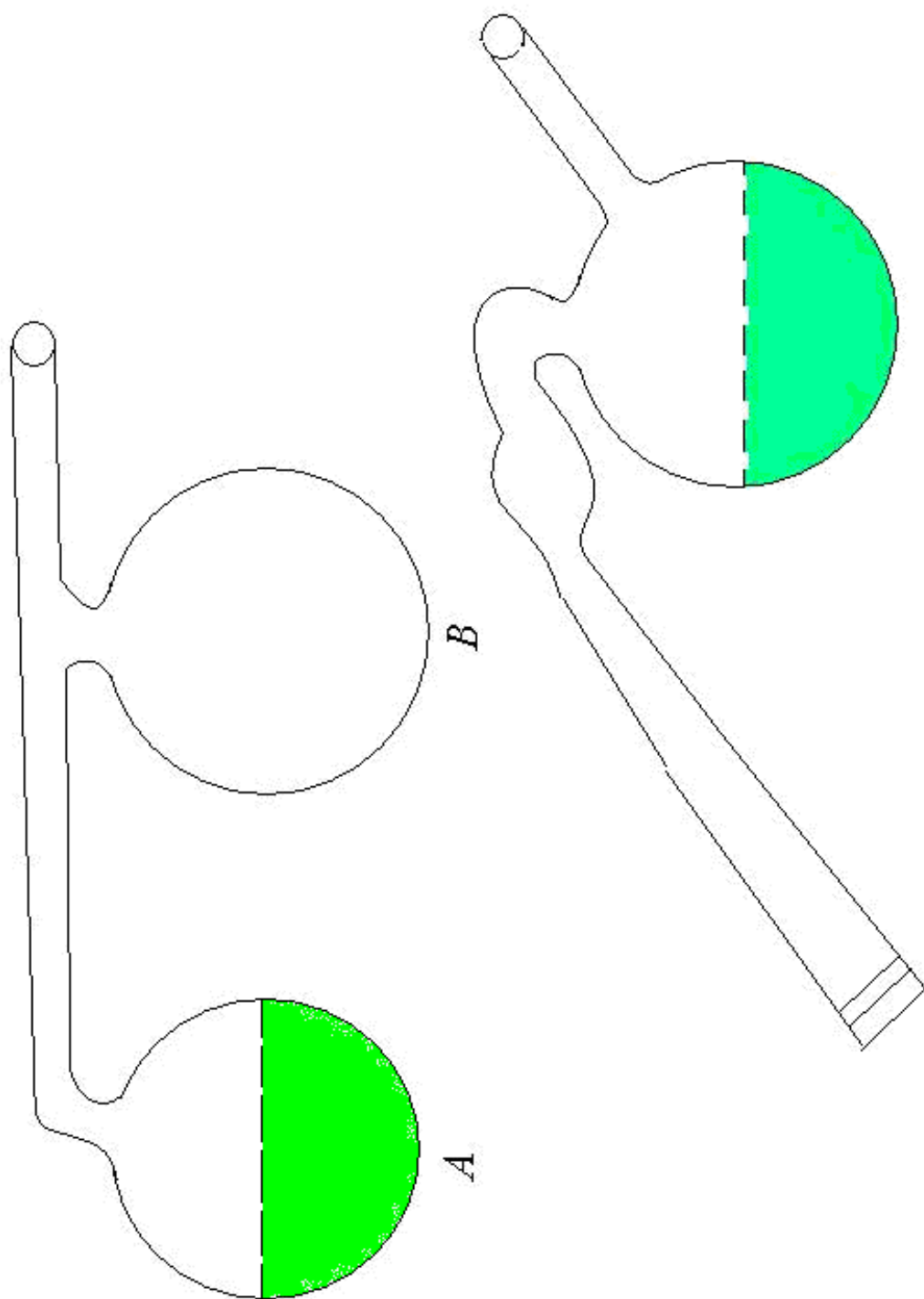


2.7-расм. Юқори босимли кювета термостатнинг тузилиш. 1- юқори босимли кювета, 2-химоя қатлами, 3-вакуумли ташқи қобик, 4-5-лазер нурланиши ва сочилган нурланишлар учун мўлжалланган тирқишлар, 6-модданинг киритиш жойи, 7-сильфон, 8-манометр, 9-термопарани кириш жойи, 10-11-юқори босимли вентллар, 12-резина коплама, 13-тутқич, 14-болтлар, 15-лазер нурланиши учун ташқи тирқиш, 16-қопқок, 17-болтлар

2.3. Ўрганилаётган объектларни тажрибага тайёрлаш ва аралашмалар тайёрлаш усули

Объектларни экспериментал тайёрлаш учун ўша текширилаётган намуна тоза бўлиши керак, яъни чанг ва бошқа аралашмалардан ҳоли бўлиши керак. Озгина аралашмалар ҳам молекулалар сочилишидан четланишга олиб келиши мумкин. Текширилаётган модда химиявий таркиби жиҳатидан ҳам тозаланган бўлиши керак. Тозалаш вакуум остида қайта ҳайдашдан иборат бўлиб иккита бир-бирига уланган шарикдан иборат (2.8-расм).

Энг аввал моддани тозалашдан олдин шариклар ва Вуд трубкаси дистрланган сув билан тоза қилиб спирт билан чайилгандан сўнг қуритиш шкафида қуритилган. Текширилаётган модда бир-бирига уланган шариклардан бирига солинади. Лекин шариклардан бири Вуд турбкасига уланади, улангандан кейин шариклардан бири, яъни текширилаётган модда солинган шарик печкага солинади ва маълум бир қайнаш температурасигача қиздирилади. Натижада қиздирилаётган шарикдаги модда солинган таркибидаги чанг зарралари сув ва бошқа аралашмалар аста секин ўша модданинг таркибидан четлаша бошлайди, яъни ўрганилаётган объект буғланиб шариклардан бирига ўтиб кетади. Экспериментга тайёрланаётган моддани айнан шу йўл билан бир неча марта тозаланилади ва ниҳоят ўзи алоҳида тоза ҳолича қолади. А шарикка суюқлик қўйилиб углекислота ёрдамида ёки қуруқ муз ёрдамида совутилиб ҳавоси сўриб олинади. Вакуум қилингандан сўнг О нуқтаси кавшарланиб ва печкага қўйилиб қайта ҳайдалади. Б шарик қайта ҳайдалган суюқлик билан кесиб олиниб Вуд трубкасига уланади. Вуд трубкасига улангандан сўнг қайта ҳайдаш йўли билан тозаланади ва Вуд трубкасига ўтказилади, сўнг Д нуқтадан кесиб олиниб Вуд трубкасининг таг қисми билан ёнбош қисмларидан ташқари ҳамма томони бўялади. Бундан мақсад бошқа томонларга сочилган ёруғлик турлича ютилиши учун юқорида айтилганидек Вуд трубкаси экспериментга тайёр ҳисобланади.



2.7-расм. Вуд грукбаси

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 килувчи чанг заррачаларидан модда тоза бўлиши керак
- В) модда флуоресценция бермайдиган бўлиши керак. Кўп ҳолларда флуоресценция тозаланмаган суюқликларда 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 кимёвий тоза (ХЧ) ёки таҳлил учун тоза (ЧДА) марқада олинган, кенг қўшимча тозаланган бўлиши керак.

Суюқлик олдиндан фосфор беш оксиди ёрдамида куритилади. 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 мол 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 мол 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 кўринадики, исталган концентрацияни эритилган модда ҳажмининг эритувчи ҳажмига нисбатан орқали ифодалаш мумкин.

Идишни тўлдириш ва концентрацияни олиш учун шприцдан фойдаланилади. Бундай оддий қурилма зарур концентрацияни етарлича тез ва аниқ тайёрлашга имкон беради [19].

II. боб бўйича хулоса

Ҳозирги кунда моддани тузилишини уни физика-кимёвий хоссаларини, спектрал чизиқлари контурларини шаклланишига таъсир этувчи омилларни ва ички молекуляр ва молекулалараро ўзаро таъсир кучларини экспериментал ўрганиш учун юқори ажрата олиш қобилиятига эга бўлган тадқиқот қурилмаси зарур. Бу бобда биз ДФС-24 спектрометри, оптик кювета-термостат ва $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ тўлқин узунлигига эга аргон лазерларидан ташкил топган тадқиқот қурилмасини ва уларнинг ишлаш усулларини, ўрганилаётган объектларни тажрибага тайёрлаш ва олинган тажриба натижаларини қайта ишлаш усулларига тўхталганмиз.

Қурилма автоматлаштирилган, компьютерга уланган. Тадқиқот объектига боғлиқ равишда спектрларни ёзишда аппарат функциянинг ярим кенглиги назорат қилинган.

Ш.Боб. Тажриба натижалари ва уларнинг таҳлили

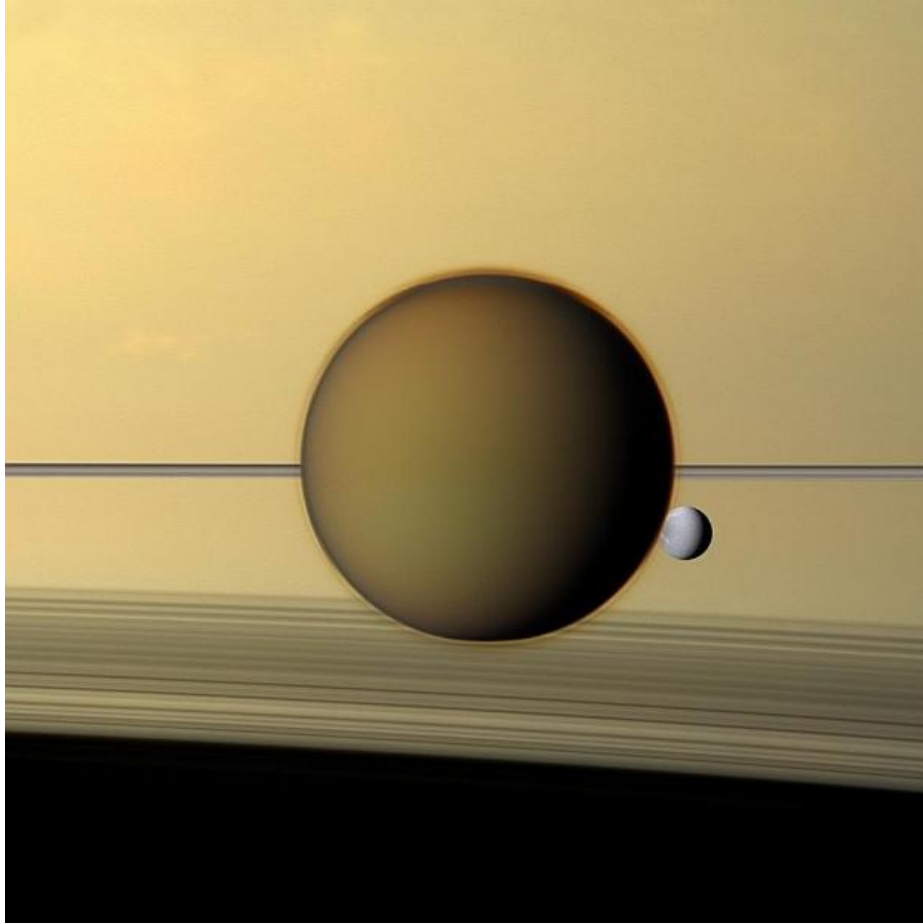
3.1.Қуйимолекулали углеводородларнинг (метан, этан) физика-кимёвий хоссалари

Метан (лотинча- *methanum*) – гомологик алканлар қаторини биринчи аъзоси, нормол шароитда рангсиз содда углеводород. Кимёвий формуласи – CH_4 , сувда кам эрийдиган газ. Ҳавода эркин ҳолда учрайди. Ишлаб чиқаришда, саноатда ва маиший соҳаларда метанга махсус ҳидли одоронтлар (одатда тиоллар) аралаштириб ишлатилади. Одоронтлар билан бойитилишига сабаб, тиоллар ўз вақтида метан идишдан чиқаётганлигини пайқаш учун керак. Инсон соғлиги учун зарарсиз газ. Бироқ метанни захарли моддалар гуруҳига тегишлилигини инобатга олсак, у марказий асаб тизимига таъсир кўрсатади. Ёпиқ идишда йиғилса портлаши мумкин. Метан бошқа алканлар каби радикал алмашинув реакциясига киришади.

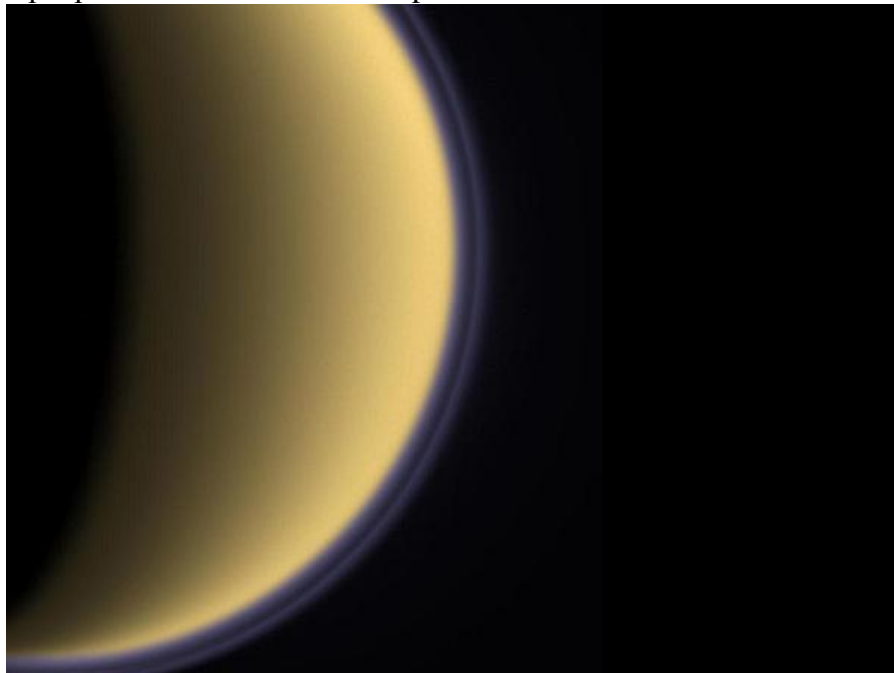
Метан фақат $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ дан ўтган сув буғлари билан $800-900^\circ\text{C}$ да реакцияга киришиши мумкин. Католизаторларсиз фақат $1400-1600^\circ\text{C}$ да реакцияга киришади. Синтез газ реакцияси асосан метанол, углеводородлар, сирка кислотаси, ацетолдигидрид ва бошқа маҳсулотлар синтезига ишлатилади. Метанни ҳаводаги концентрацияси 4,4% дан 17%гача бўлганда портлаш хавфи бор. Асосан 9,5% концентрацияда портлаш хавфи юқори. Хавфлилик даражаси 4 га тенг.

1813-йилда Сэр Хемфери Деви ўз таҳлилларида метан кон газлари таркибида борлигини айтиб ўтган. Метан табиатда табиий газнинг (77-99%) асосий компоненти бўлиб, шунингдек нефть-газлари аралашмасининг (31-90%) ни ташкил этади. Шу сабабли ботқоқ ёки кон газни ҳисобланади. Аноэроб шароитда (намлик юқори бўлган ботқоқ ўсимлик илдизларида, қавш қайтарувчи ҳайвонлар ошқозонида), баъзи бир микроорганизмлар ҳаёт фаолияти натижасида биоген ҳосил бўлади. Ҳозирги замон маълумотларига кўра метан қуёш системасини улкан сайёралари атмосферасида мавжуд. Масалан, температураси (-180°C) га тенг Сатурннинг йўлдоши Титан

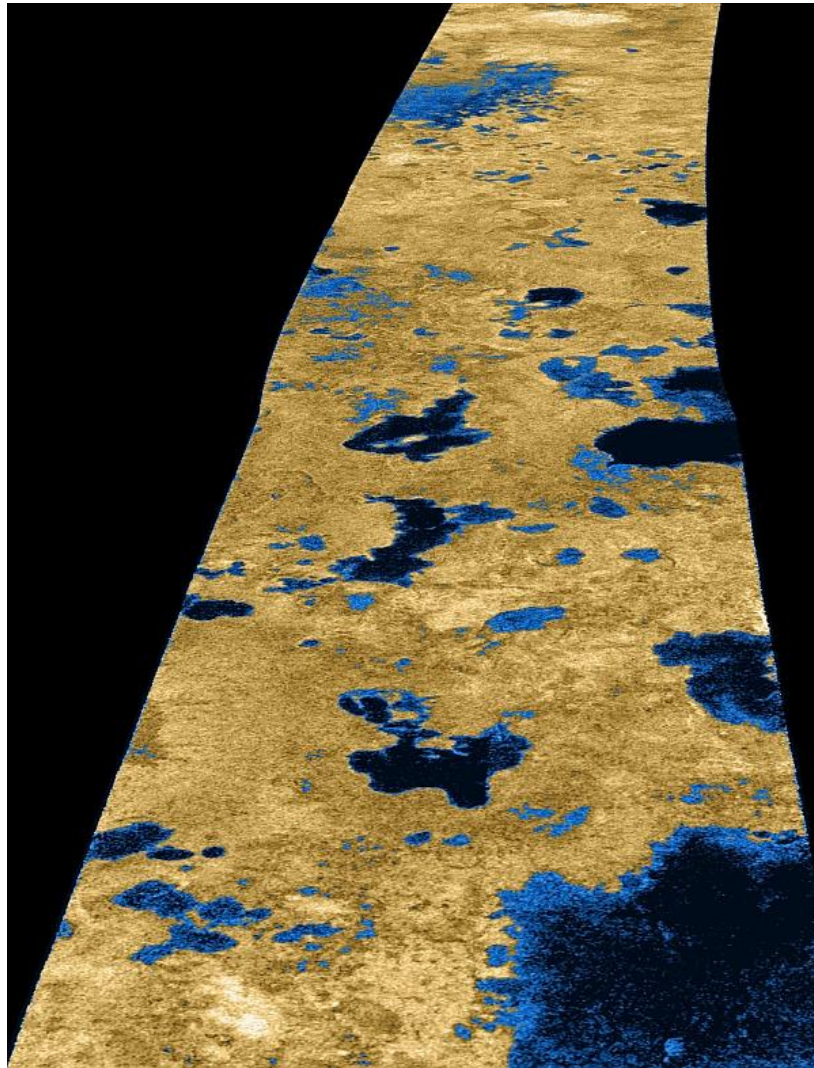
сиртида метан-этан аралашмали кўл ва дарёлар мавжудлиги аниқланган, 3.1-3.2-3.3-расмларда келтирилган [15].



3.1-расм. Сатурн йўлдошлари: катта Титан ва кичик Диона.
(Тасвирлар NASA / JPL-Caltech / Space Science Institute томонидан олинган)



3.2-расм. Титан атмосферасининг кўриниши



3.3-расм. Титан сиртининг шартли рангларда кўриниши. Тўқ-кўк ранглар углеводородли кўлларни билдиради.

Метан ҳосил бўлишига кўра қуйидаги синфларга бўлинади:

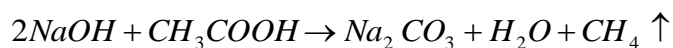
Абиоген – карбид металллар сув билан ўзаро таъсирида, яъни ноорганик бирикмалар, кимёвий реакциялар натижасида ҳосил бўлади.

Биоген-органик моддаларни кимёвий трансформациялаш натижасида пайдо бўлади.

Бактериал (микробли)-бактериялар ҳаёти фаолияти натижасида ҳосил бўлади.

Термоген-термохимик жараёнларни бориш йўналишида ҳосил бўлади.

Метанни олиниши: Лабораторияда натрий ва кальций гидрооксидини ёки сувсиз натрий гидрооксидини муздек сирка кислота билан реакцияси натижасида олинади.



Кимёвий хоссалари: Ҳавода кўк ёруғлик чиқариб ёнади. 1 м^3 метан ёнганда 39 Мж энергия ажралади. Нормал босимда музлаш ҳарорати -184°C . Масалан асосан ёқилғи саноатида ва органик синтез маҳсулот сифатида фойдаланилади.

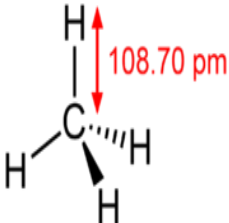
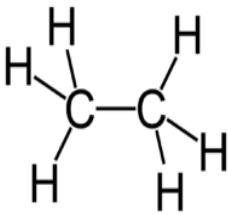
Метанни экологияга таъсири: Ис газига нисбатан кучли бўлган парник газ бўлишига сабаб унинг молекуласида ютилиш спектри қуйи инфрақизил соҳада жойлашган. Агар атроф муҳитга ис газининг таъсирини 1 га тенг деб олсак метанни парник активлиги 21 га тенг [20].

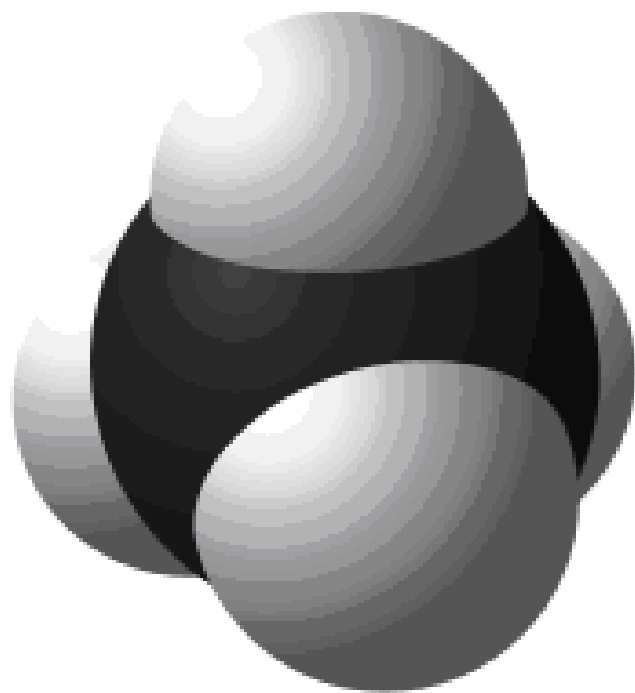
Этан (лотинча - ethinum) - C_2H_6 гомологик алканлар қаторини иккинчи аъзоси табиатда табиий газ, нефть ва бошқа углеводородлар таркибида мавжуд бўлиб, метанга солиштирганда ёнувчан ва портловчи газ, ҳамда захарли, хавфлилик даражаси 4 га тенг, нормол шароитда рангсиз, таъмсиз газ.

Кимёвий хоссалари: Кимёвий формуласи C_2H_6 (CH_3CH_3 га тенг кучли). Гологенларни водородга алмашилиш реакциясига характерли. Реакция эркин радикаллар механизмида боради. Этанни термик гидридлашда $550\text{-}650^\circ\text{C}$ да этелинга айланади. 800°C дан юқори температурада ацетилинга айланади. Ишлаб чиқаришда этанни нефть ва табиий газлар таркибидаги ҳажмий миқдори 10%. Лаборатория шароитида Вюрсо реакциясида йодметандан олинади. Асосан этан саноатда этелин олиш учун ишлатилади. 3.1-жадвалда метан ва этаннинг физика-кимёвий хоссалари келтирилган.

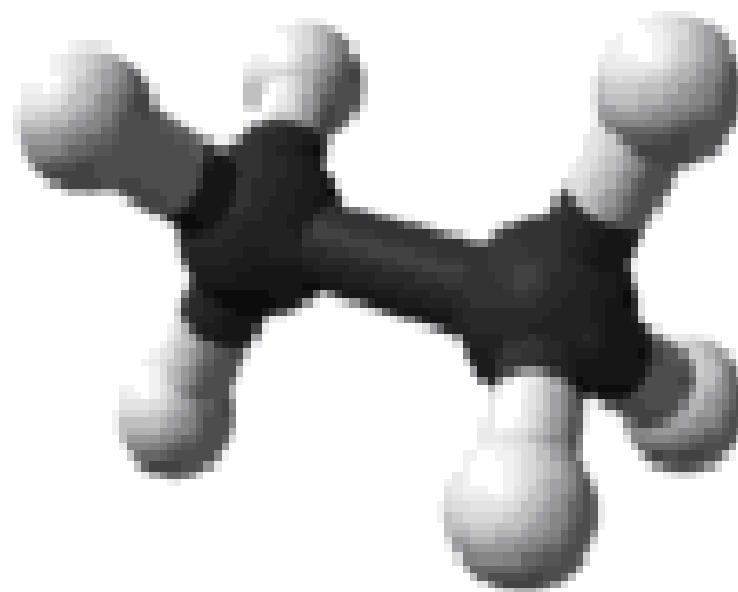
Метан ва этаннинг физика-кимёвий хоссалари

3.1-жадвал [15]

Кимёвий модда	Кимёвий формуласи	Структурвий тузилиши	Моляр массаси M (г/мол)	Зичлиги ρ (г/м ³)	Ҳолати	Қайнаш ҳарорати T (C ⁰)	Эриш ҳарорати T (C ⁰)	Сувда эрувчанлиги	Синдириш кўрсаткичи
Метан	CH ₄		16,04	0,7168	газ	-161,6	-182,5	Кам эрийди	-
Этан	C ₂ H ₆		30,07	1,342 (суюқ этаннинг зичлиги 561кг/м ³)	газ	-88,6	-182,8	Кам эрийди	-



а)



б)

3.4-расм. а) метан б) этаннинг молекуляр тузилиши

3.2. Қуйимолекулали углеводородларнинг комбинацион сочилиш спектри

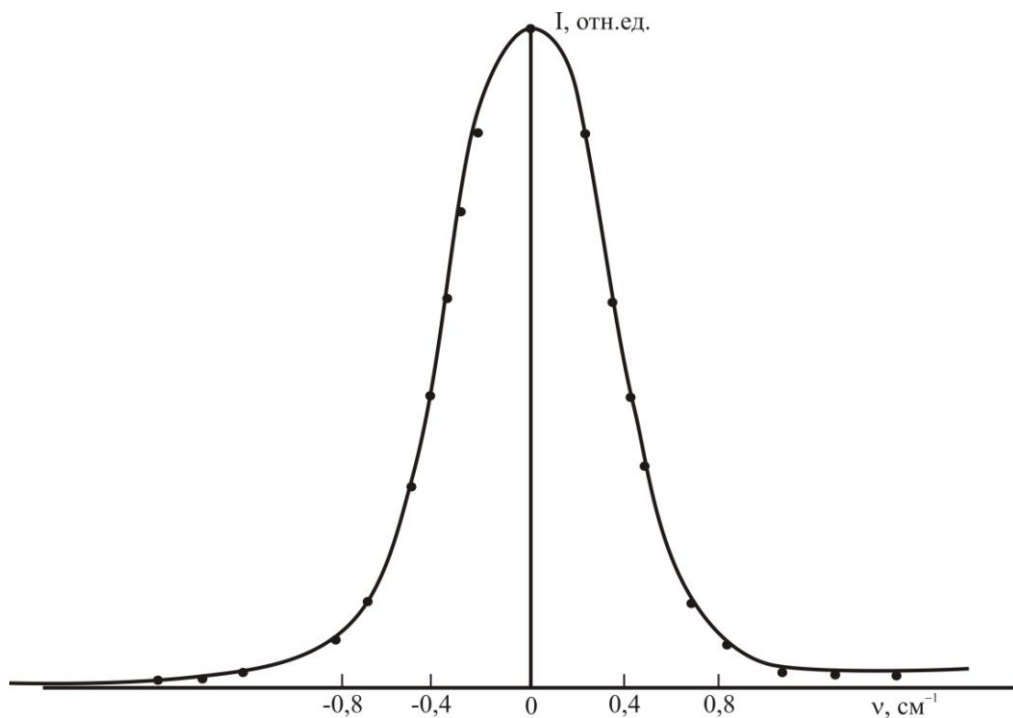
Қуёш барча турдаги бизга маълум энергияларнинг манбаи. Нефть, газ, тошқўмирлар-миллиард йиллар давомида қуёш таъсирида ҳосил бўлган биомассалардир. Ҳозирги кунда қуйимолекулали углеводородлар автомашиналарда, иситиш тизимларида ва бошқа мақсадларда ёнилғи сифатида ишлатилади. Қуйимолекулали углеводородларнинг оптик хоссаларини билиш улардан кенг фойдаланиш имкониятини беради, шу сабабли уларнинг комбинацион сочилиш спектрларини ўрганиш долзарблигига киришда тўхталганмиз.

XX асрнинг 50-60-йилларида Г.С.Лансберг, П.А.Божулин, М.М.Сушенскийлар углеводородлар спектроскопиясига бағишланган монографияни эълон қилишди [21,22]. Шундан бери анча вақт ўтди ва молекуляр спектроскопиянинг имкониятлари ўсди ва кенгайди.

Экспериментал тадқиқотлар асосида метан (CH_4) ва этан (C_2H_6) нинг комбинацион сочилиш спектри босим ва температуранинг кенг интервалида ўрганилди.

Экспериментал тадқиқотлар қўшалок монохроматорли ДФС-24 спектрометри ва оптик кювета-термостат базасида йиғилган тажриба қурилмасида амалга оширилди (2.6-расмда келтирилган). Ёруғлик манбаи сифатида $\lambda = 488,0$ нм тўлқин узунликли ва қуввати 1 Вт бўлган аргон лазеридан фойдаланилди [23-25].

Метанни тўла симметрик $\nu_1 = 2916,5 \text{ см}^{-1}$ тебранма спектрал чизиғи ўрганилди (тўла қутбланган, қутбсизланиш даражаси $\Delta = 0$ га тенг). Шунинг учун қутбсизланиш даражасини тажрибада аниқлаш шарт бўлмади. ν_1 спектрал чизиғи контури ярим кенглиги $\pm 0,1 \text{ см}^{-1}$ аниқликда ўлчанди. Қурилма тирқишининг кенглиги $40 \div 100$ мкм ни, аппарат функция ярим кенглиги $0,8 \div 1 \text{ см}^{-1}$ ташкил этди. Аппарат функция контури 3.5-расмда келтирилган [26].



3.5-расм. ДФС-24 спектрометрнинг аппарат функцияси:
 _____ _ экспериментал контур, $\Delta\nu_{an} = 0,8\text{см}^{-1}, \dots$ -гаусс контури

Кузатиладиган контурнинг ҳақиқий ярим кенглиги Танабе формуласи ёрдамида аниқланди [27]:

$$\Delta\nu_{1/2}^{xak} = \Delta\nu_{1/2}^{kyz} \left[1 - \left(\frac{\Delta\nu_{1/2}^{an}}{\Delta\nu_{1/2}^{kyz}} \right)^2 \right]$$

Ярим кенгликни аниқлашда йўл қўйилган хатоликлар [27]:

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left(\Delta\nu_{1/2i} - \overline{\Delta\nu_{1/2}} \right)^2}{n(n-1)}}$$

формула билан аниқланди.

$\overline{\Delta\nu_{1/2}}$ - ўртача қиймат

$\Delta\nu_{1/2i}$ - алоҳида ўлчашлар

n - ўлчашлар сони

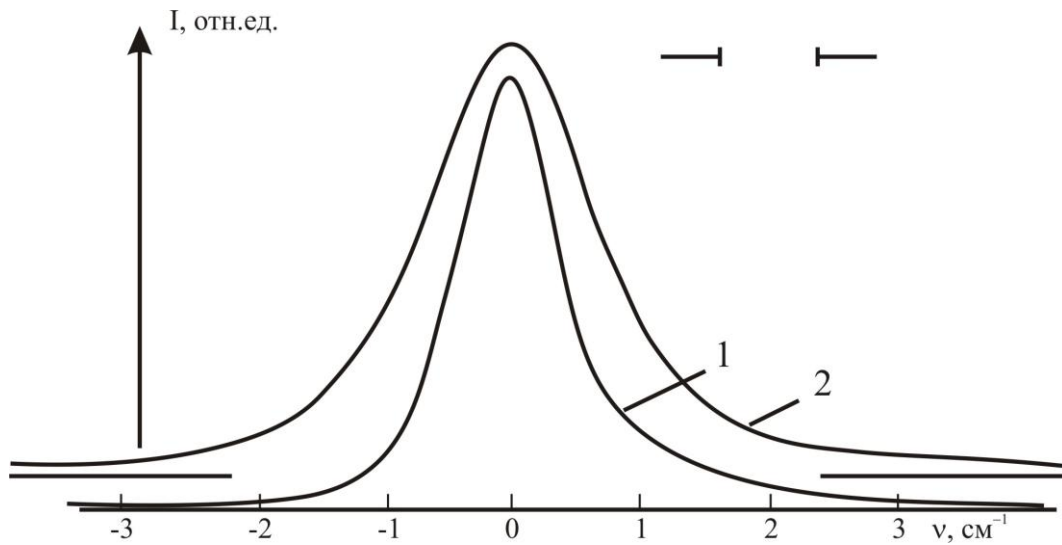
$\overline{\Delta\nu_{1/2}} - \Delta\nu_{1/2i}$ - ўртачадан четланиш кузатиладиган контурнинг ярим

кенглиги

$$\Delta \nu_{1/2}^{\text{кўз}} = \Delta \nu_{1/2} \pm \delta^{\text{кўз}}$$

ифода билан аниқланди.

Бизнинг тажрибаларда метаннинг ν_1 спектрал чизиғи контури ярим кенглиги 10 Амага зичликгача ўзини ярим кенглигини ўзгартирмайди. Зичлик ортиши билан ярим кенглик зичликга чизиқли боғлиқ ҳолда ортиб боради. Паст зичликларда ассимметрик кўринишга эга бўлган контур юқори зичликларда симметрик ҳолатга кела бошлайди (3.6-расм).

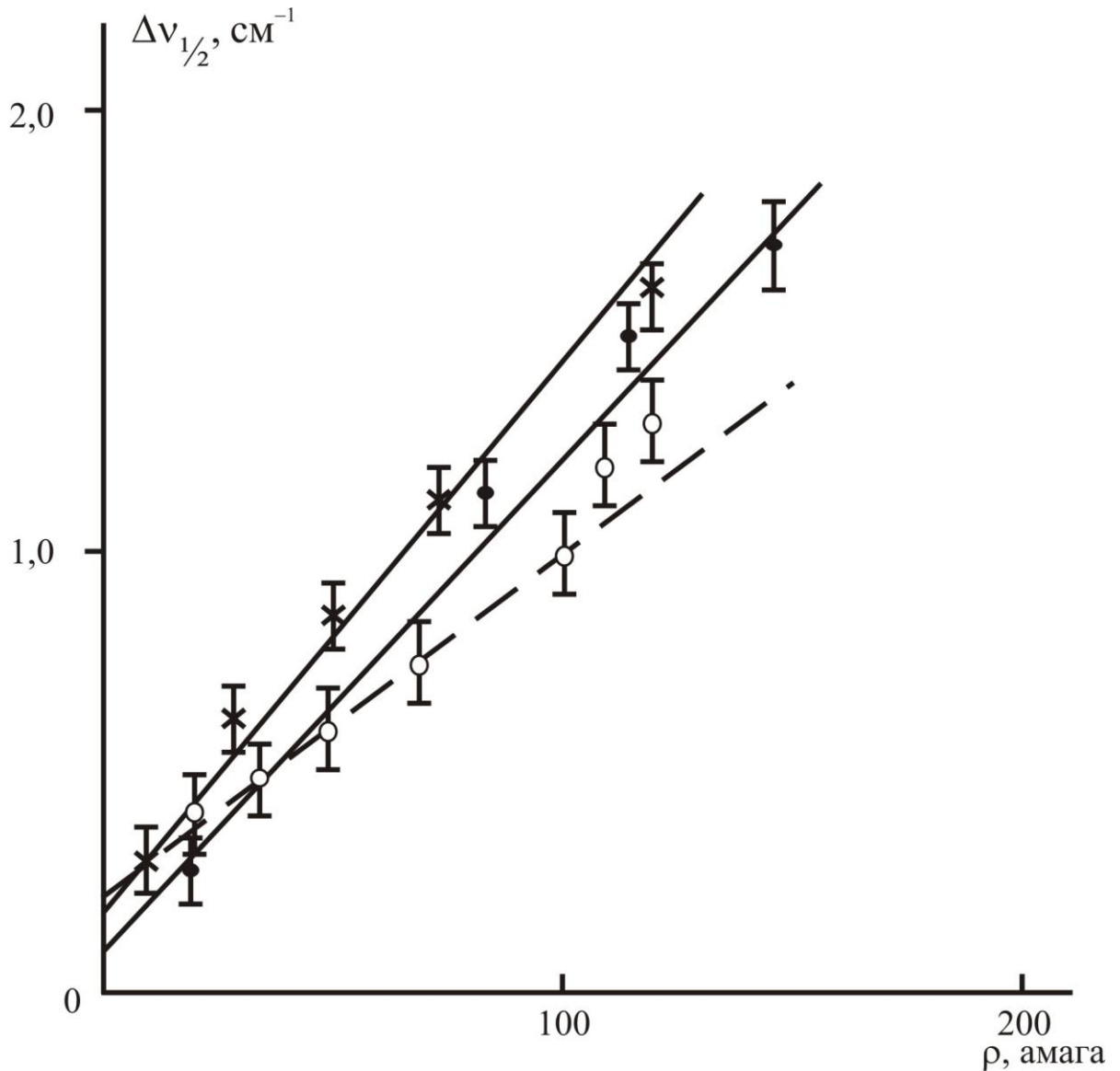


3.6-расм. CH_4 нинг $T=295$ К температурадаги ν_1 контур полосаси:
1- $\rho=20$ Амага, 2 – 85 Амага. $\nu_1=2916,5 \text{ см}^{-1}$

Ярим кенгликни зичликга боғлиқлик характери аниқлаш учун кенгайиш коэффиценти аниқланди. Кенгайиш коэффицентлари орасида қуйидаги муносабат бажарилди:

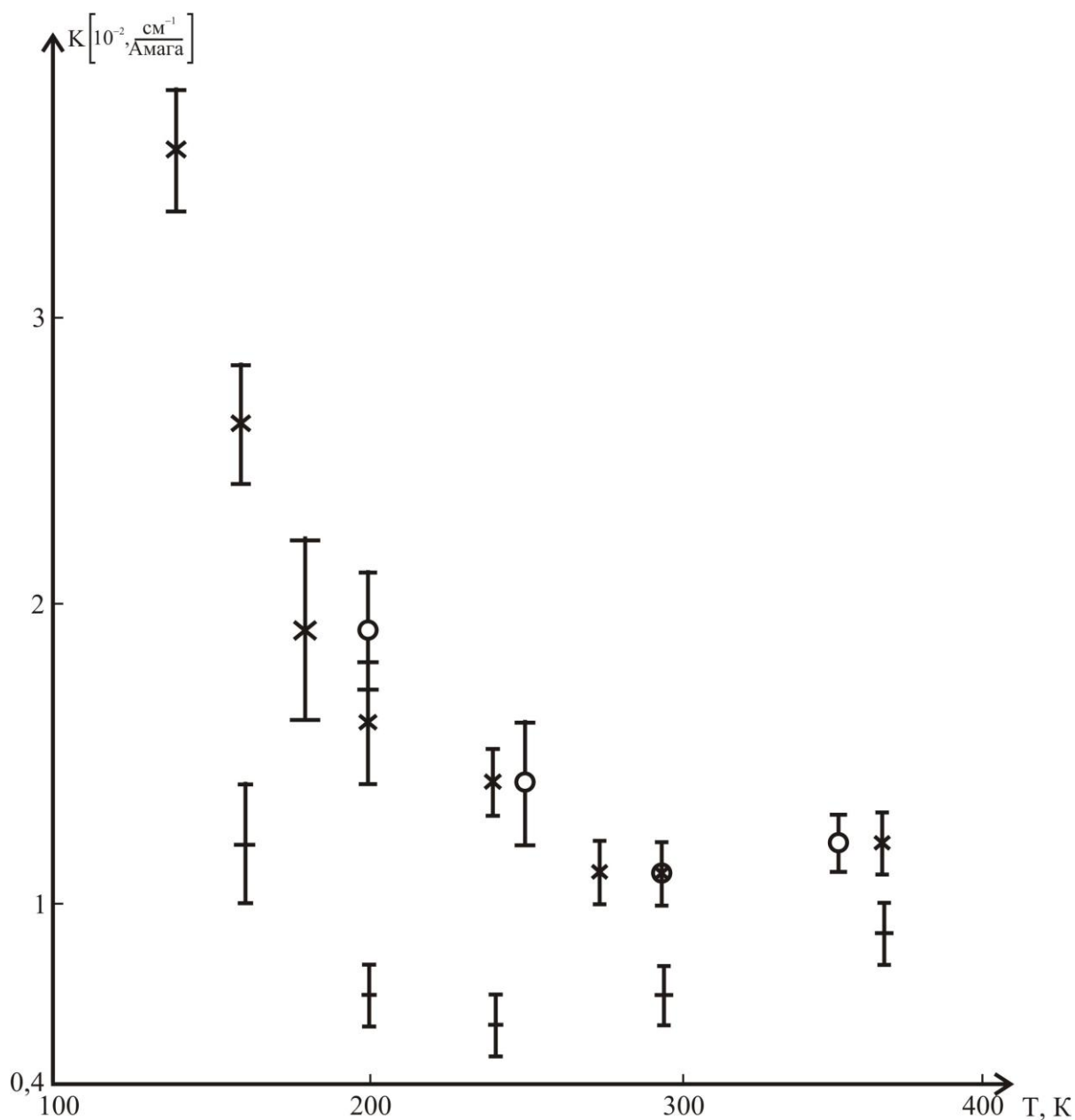
$$K(\text{CH}_4 + \text{CH}_4) \approx K(\text{CH}_4 + \text{Kr}) > K(\text{CH}_4 + \text{Ar})$$

Ярим кенгликни зичликдан боғлиқлиги 3.7-расмда келтирилган. Расмдан кўриниб турибдики ярим кенглик зичликга чизиқли боғлиқ равишда ортиб бормоқда.



3.7-расм. CH_4 ν_1 контур полосасининг ярим кенглигининг $T = 295$ К температурада зичликка боғлиқлиги. • - тоза метан, ◦ - Ar билан аралашмаси * - Kr билан аралашмаси

Температурани ўзгариши кенгайиш коэффициентини бир хил ўзгаришга олиб келмоқда. Температуранинг ошиши билан олдин кенгайиш коэффициенти бирор-бир T_{\min} етгунча камаяди, кейин ошиши кузатилди (3.8-расм)



3.8-расм. CH_4 ν_1 контур полосаси кенгайиш коэффициентининг аралашма температурасига боғлиқлиги: * - CH_4 , - - $\text{CH}_4 + \text{Ar}$, o - $\text{CH}_4 + \text{Kr}$.

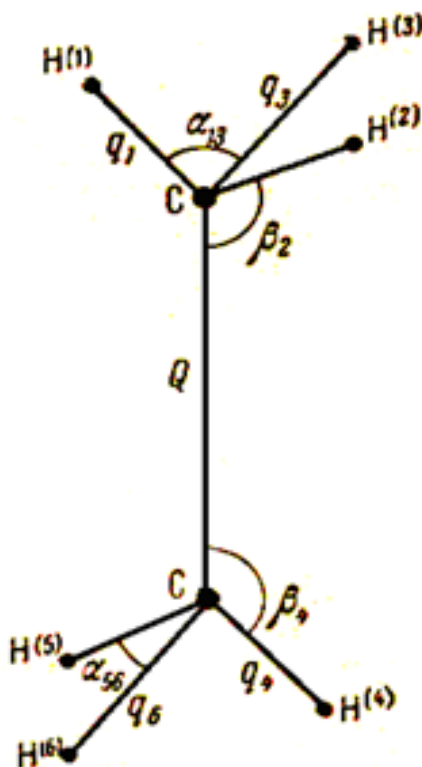
Метанни ν_1 тўла симметрик тебранма спектрал чизиги контурини босим ортиши билан кенгайишини кўпгина механизмлари анализ қилинди. Контурнинг кенгайишига асосий сабаб ўзаро тўқнашувларда тебранишлар фазасини бузилиши билан бир қаторда тебранма-айланма энергетик релаксацион жараёнлар ҳам сабаб бўлиши мумкин.

Этан (C_2H_6) – С-С боғга эга оддий молекула бўлиб, 18 та тебранма эркинлик даражага ($3N-6=18$) ва битта тебранма-айланма эркинлик даражасига эга [28]. Этан бир-бирига 60° бурчакка бурилган (3.8-расм)

$D_{3d}(S_6)$ симметрияли молекулага эга. Айланма тебранишларнинг A_{2g} актив бўлмаган частоталар айнан 3та A_{1g} типли частоталар ва комбинацион сочилиш спектрларида актив 3та E_g частотали 11та тебраниш частоталарига эга. шунингдек, A_{1u} ли 2та ва E_u типли 3та инфрақизил спектрида актив бўлган 5та частоталарга эга.

Қисқа кўринишда:

$$3A_{1g} + 3E_g + 2A_{1u} + 3E_u = 11$$



3.9-расм. Этанда ҳосил бўладиган тебранишлар

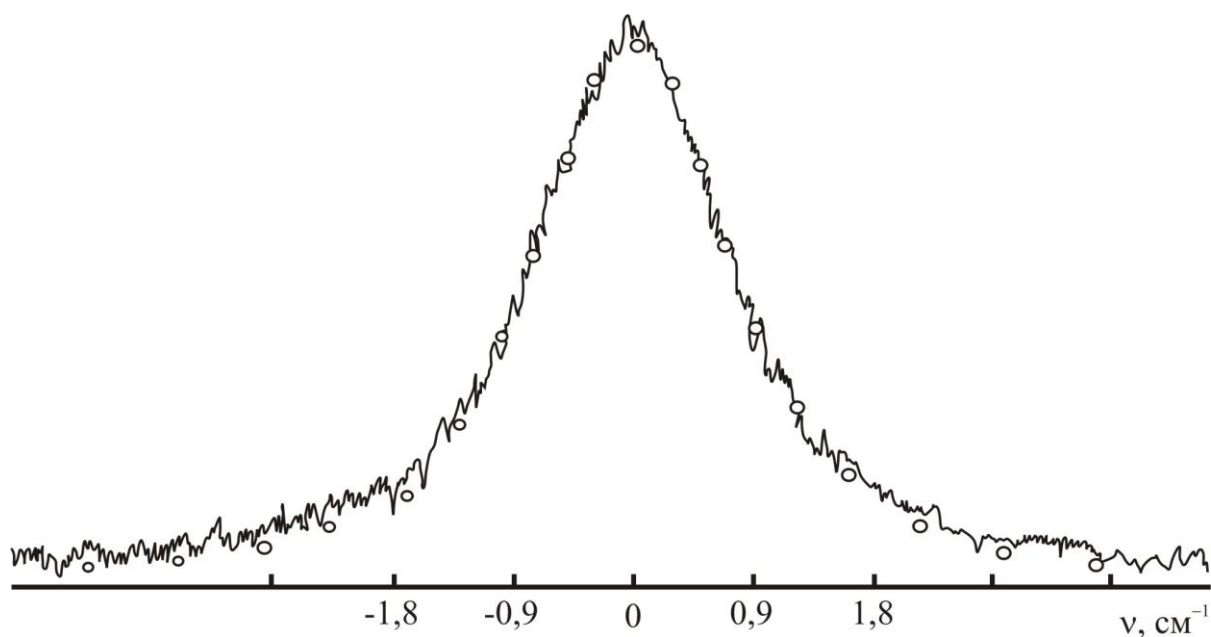
3.9- расмда Q координата (C- C боғ ўзгариши) ва q_i, d_{ij}, b_i эквивалент 6 та координата (q_i боғ ва d_{ij}, b_i бурчаклар ўзгариши ҳисобига). C-C боғга A_{1g} типли валент тебранишлар мос келади. C-H учта боғ, H-C-H ва C-C-H уч бурчак мос келади. Этаннинг тебранма спектри интеграцияси ва ҳисоб-китоблар натижаси 3.2-жадвалда келтирилган [26].

Симметрия типи	Тебраниш тури	C ₂ H ₆	
		кузатилган	ҳисобланган
A _{1g}	Q	993	997
A _{1g}	αβ	1375	1376
A _{1g}	q	2925	2901
E _g	β	1170	1167
E _g	α	1460	1467
E _g	q	2960	2970
A _{1u}	αβ	1380	1380
A _{1u}	q	2895	2897
E _u	β	827	827
E _u	α	1465	1472
E _u	q	2980	2980

Биз этаннинг C-H боғланишга мос келувчи $\nu = 2925 \text{ см}^{-1}$ тебранишларини ўргандик. Тадқиқ қилинаётган зичликда контур ассиметрик структурага эга, бироқ зичликни ортиши билан контур симметрик бўлиб, кенгая борди, 60 Амага ва ундан юқори зичликларда этаннинг $\nu = 2925 \text{ см}^{-1}$ контур полосаси симметрик бўлиб, Фойхт эгри чизиғининг 3-4 ярим кенглиги соҳасига мос келади. Бу шартларда ҳақиқий контур Лорентц контурига тўғри келади деб тахмин қилинди.

Тажрибаларда этаннинг газ ҳолатида кичик зичликларда $\nu = 2925 \text{ см}^{-1}$ контур ярим кенглигини ўзгартирмайди, кейин эса зичликнинг ортиши билан ярим кенглик ортади. Худди шундай натижа CH_4 нинг ν_1 спектрал контури учун ҳам кузатилган [22,23].

Этаннинг С-Н тебранишларининг комбинацион сочилиш спектрларини ўрганиш бошқа бир қанча қийинчиликлар туғдиради. Тахминан бир соҳада $\nu_g = 2960 \text{ см}^{-1}$ E_g тебранишлар жойлашган. Лорентц қаторига мос келувчи битта чизиқ шаклигача этаннинг газ ҳолдаги $\nu = 2925 \text{ см}^{-1}$ полосалар трансформацияланишида паст босимларда тебранма структура асосий рол ўйнаганини тадқиқот натижалари тасдиқлади. Бу контурларнинг шаклланиши тебранма энергетик сатҳларнинг жойлашишига боғлиқ бўлиши мумкин (3.10-расм) [29].



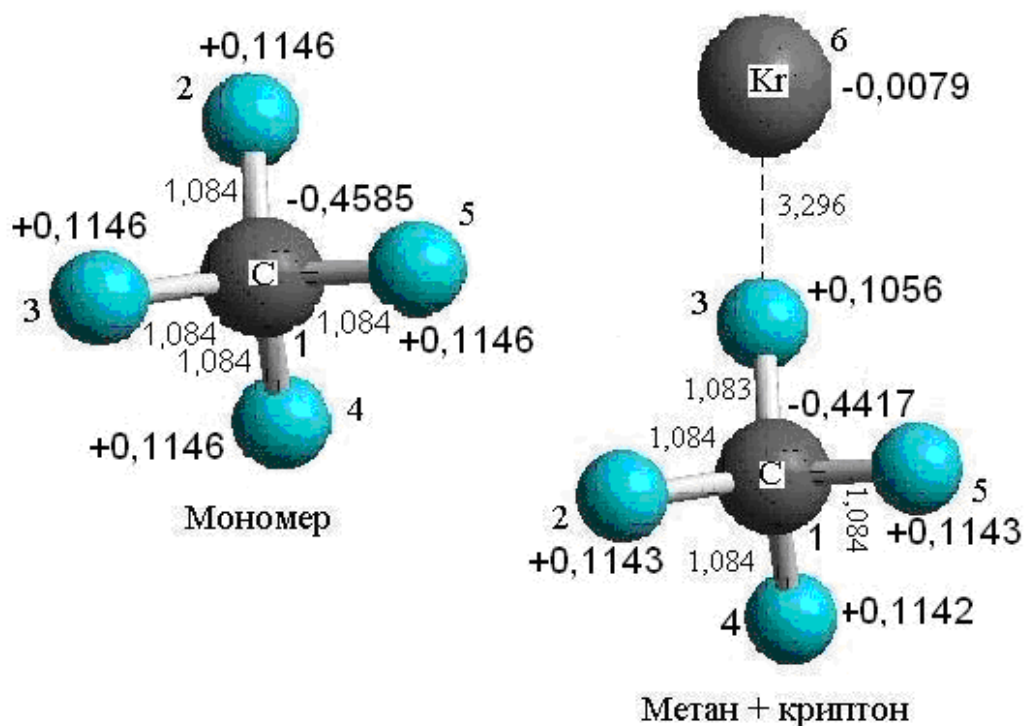
3.10-расм. Этан (C_2H_6)нинг температурада $T = 295 \text{ К}$ ва $\rho = 110 \text{ Амага}$ даги $\nu = 2925 \text{ см}^{-1}$ контур полосалари: $000 - 1,6 \text{ см}^{-1}$ ярим кенгликли Лорентц ва $0,8 \text{ см}^{-1}$ ярим кенгликли гаусс эгри чизиғи учун эталон Фойхт контури

Шундай қилиб, оғир CD_4 ва енгил CH_4 ларнинг комбинацион сочилиш (КС) спектрларини ўрганиш шуни кўрсатадики, тўла симметрик тебраниш ν_1 спектрал чизиғи контурининг торайишини тажрибаларда кузатиб бўлмайди. Бу натижа ўтказилган сўнгги тадқиқотларда ҳам тасдиқланган. Мазкур спектрал чизиқлар контурининг шаклланишида тебранма кенгайиш муҳим ўрин тутди деб айтиш мумкин. Амалга оширилган баҳолашлар шуни кўрсатадики, ҳам энергетик релаксация ҳам тебранишлар фазасининг бузилиши бу жараёнда муҳим аҳамият касб этиши мумкин [30].

3.3. Назарий ҳисоблашлар ва тажрибада аниқланган натижаларнинг таҳлили

CH_4 молекуласининг бошқа зарралар билан ўзаро таъсирини янада аниқлаштириш мақсадида биз Хартри–Фок яқинлашувида RHF-631G (d,p) базисли Гаусс функциялари тўпламига эга бўлган Гауссиан 98 W дастури асосида квант-кимёвий *ab initio* ҳисоблашларни ўтказдик. Ҳисоблашлар изоляцияланган мономер молекула, икки ўзаро таъсирлашувчи метан молекуласи, метан билан таъсирлашувчи битта криптон атоми учун амалга оширилди.

Молекулалардаги атомлар оралиғи боғланишлар узунликлари зарядлар тақсимооти (3.11-расм), тебранишлар частоталари ҳамда спектрал чизиқларнинг кутбсизланиш коэффициентлари аниқланди [31,32].



3.11-расм. Метан молекуласи ва CH_4+Kr агрегатининг тузилиши (зарядлар электрон заряди бирлигида, масофалар ангстремларда берилган)

Юқорида айтиб ўтилгандек, иккита CH_4 молекуласининг ўзаро таъсирлашуви дисперсион табиатга эга бўлиши лозим. Таъсирлашувчи молекулаларнинг битта C–H боғланиши бошқа C–H боғланишлардан фарқ

қилар экан. Бу боғланиш водород атомининг заряди бошқа водород атомининг зарядидан фарқ қилар экан. Иккита CH_4 молекуласидан иборат агрегат учун ν_1 тебраниш частотаси, мономер молекула частотасидан фарқ қилмайди $3168,7 \text{ см}^{-1}$ тенг (ҳисоблашлар одатда частотанинг 10-15 % га ортиқ қийматини беради, қутбсизланиш коэффициентини нолга жуда яқин 0,0004).

Метан молекуласи билан Kr атоми ўртасида ҳам ўзаро таъсирлашув мавжуд CH_4 ва криптонда дипол моменти бўлмаган шароитда ўзаро таъсирлашув дисперсион бўлиши лозим, лекин CH_4 криптон ўзаро таъсирлашуви маълум бир йўналишга эга.

Криптон атоми CH_4 га C-H боғланишлардан бирига яқинлашади 3.11-расмда Н(3). C-H(3) ... Kr (1) масофа $3,297 \text{ \AA}$ тенг. Н(3) атоми C(2) ва Kr(1) атомлари тахминан бир тўғри чизиқда ётади. C-H(3) боғланиш хоссалари қолган учта C-H боғланишлардан биров фарқ қилади, яни C-H(3) боғланиш биров қисқароқ. Бундан ташқари Н(3) нинг заряди бошқа учта Н атоми зарядидан фарқ қилади.

Ўзаро таъсирлашувда Kr атоми унчалик катта бўлмаган манфий зарядга эга бўлади. $\text{CH}_4 + \text{Kr}$ агрегати тебранишига тўлқин сони $3171,5 \text{ см}^{-1}$ тенг бўлган ν_1 спектрал чизиғи мос келади, бу эса соф метандагидан 255 см^{-1} га каттадир [33,34].

Хулоса

1. Мавзу юзасидан ҳозиргача мавжуд назарий ва амалий тадқиқот натижалари бўйича таҳлил ўтказилди. Қуйимолекулали углеводородлардан метан ва этанлар табиий газ таркибида юқори концентрацияли компонентлардан бўлиб, уларнинг комбинацион сочилиш спектрлари кам ўрганилганлиги, спектрал чизиқлар шаклланишига таъсир қилувчи факторларни спектроскопик ўрганиш зарурлиги маълум бўлди.
2. Юқори ажрата олиш қобилиятига эга бўлган ДФС-24 спектрометри базасида йиғилган тадқиқот қурилмасини юстировка ва фокусировка қилиш, $\lambda = 4880 \text{ \AA}$ аргон лазери ҳамда температура ва босимнинг кенг интервалида ишлаш имкониятига эга бўлган оптик кювета-термостатни ишлаш усули ўрганилди.
3. Метанни $\nu_1 = 2916,5 \text{ см}^{-1}$ частотали тўла симметрик тебраниш ўрганилганда зичлигининг ортиши билан спектрал чизиқ контурининг ярим кенглиги ортиши, спектрал чизиқ контурининг ярим кенглигини ортиши зичликга тўғри пропорционаллиги аниқланди. Ярим кенгликни зичликга боғлиқлик характерини аниқлаш учун кенгайиш коэффициентини аниқланди.
4. Температуранинг ўзгариши кенгайиш коэффициентини бир хил ўзгаришга олиб келмоқда. Температуранинг ошиши билан олдин кенгайиш коэффициенти бирор-бир T_{\min} га етгунча камаяди, кейин ошиши кузатилди.
5. Этанни С-Н боғланишга мос келувчи $\nu_1 = 2916,5 \text{ см}^{-1}$ тебраниши ўрганилганда кичик зичликларда спектрал чизиқ контурининг ярим кенглиги ўзгармаганлиги, катта зичликларда кенгайгани маълум бўлди. Бу тебранишни ўрганиш баъзи бир қийинчиликларга эга эканлиги ҳам маълум бўлди. Тахминан шу соҳада $\nu = 2960 \text{ см}^{-1}$

тебраниш ҳам жойлашган. Контурнинг шаклланишига паст босимларда тебранма ҳаракатлар фазасининг бузилиши асосий роль ўйнаши мумкин.

6. Тажриба натижаларини янада тўла тушуниш учун кванто-кимёвий ҳисоблашлар ўтказилди. Ҳисоблашлар изоляцияланган метан мономерини ва метан билан битта криптон атоми учун амалга оширилди. CH_4 метаннинг бошқа молекула билан таъсирлашуви дисперсион характерга эга эканлиги аниқланди.
7. Ҳисоблаш натижасида боғ узунлиги, зарядлар тақсимоти, қутбланиш даражаси аниқланди. Булар тажриба натижаларига мос келиши маълум бўлди.
8. Метан ва этанлар таббий газ таркибида энг катта улушга эга компонентлар бўлиб, уларнинг спектрал чизиқларини шаклланишида дисперсион ўзаро таъсир муҳим роль ўйнайди. Бундан ташқари тўқнашишларда тебраниш фазасининг бузилиши, тебранма энергетик релаксацияларни ҳам таъсири бор.

Фойдаланилган адабиётлар

1. Каримов И.А. Юксак маънавият-енгилмас куч. Т.: “Маънавият” нашриёти, 2008.
2. Ландсберг Г.С. Оптика. Т.1981.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: 1962.
4. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.1949.
5. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Москва. ИЛ, 1979.
6. Бахшиев Г.Л. Введение молекулярная спектроскопия.
7. Волькенштейн М.В. Строение и физические свойство молекул. изд. ГЛ., 1995. УФНТ 145.
8. Qo‘uliyev V.T. Optika. Т.: “Fan va taraqqiyot” nashriyoti. 2014.
9. Пиментал Д., О.Мак-Клелан. Водородная связь. Л.: 1964.
10. Хабибуллаев П.К., Буллавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х. и др. Динамика молекул в жидкостях. Т. изд “Фан”, 2009.
11. Бутиков Е.И. Оптика. М.2006.
12. Мейтленд А., Данк М. Введение в физику лазеров. М.1978.
13. Kuyliyev V.T., Orlova N.D., Pozdnyakova L.A., Tuxvatullin F.X., Jumaboev A. The ν_1 band contour in Raman spektra of methane and its gaseous mixture with. Ukrainian Journal of Physics. 2007.v.52.N5.P.445-448.
14. Фабелинский И.Л. Молекулярная рассеяния. М.: изд. “Наука”.
15. Википедии — свободной энциклопедии.
16. Технический описание спектрометра ДФС — 52.
17. Куйлиев Б.Т., Орлова Н.Д., Позднякова Л.А. Кювета-термостат высокого давления для изучение спектров комбинационного рассеяния газовых смесей. СамДУ. Илмий тадқиқотлар Ахборотномаси. 54-55 бет. 2006 й. № 3
18. Варгафтик И.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и

- жидкостей. М.: изд. "Наука", 1972. - 368 с.
19. Илм-фан ва инновация // илмий-амалий конференция материаллари. Қарши. 13-14 Май. 2013.
20. Интернет маълумотлари.
[http // www.iop.Kiev.ua/-nbp2011](http://www.iop.Kiev.ua/-nbp2011)
[http // WWW.XIXISSSM.Kiev](http://WWW.XIXISSSM.Kiev)
[http // www. Bankreferatov.ru.kasu.uz.](http://www.Bankreferatov.ru.kasu.uz)
[http // WWW.Ziyonet.uz.](http://WWW.Ziyonet.uz)
[http // WWW.Vikipediya.uz.](http://WWW.Vikipediya.uz)
21. Физика фанининг ривожига истедодли ёшларнинг ўрни // Республика илмий-амалий анжуман материаллари. Тошкент. 16 май. 2014.
22. M.J.Frisch, G.W.Trucks, H.B.Schlegel, Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, (1998).
23. Илм-фан ва инновация // илмий-амалий конференция материаллари. Қарши. 13-14 Май. 2013.
24. Актуальный проблемы молекулярной спектроскопии конденсированных сред // IV Международная конференция. Самарканд. 29-31 мая. 2013.
25. Зубова Н.В., Шаламеева Н.В., Горелик В.С., Сущинский М.М. // Препринт № 188, ФИАН Россия, 1968. С.10
26. Bartoli F.J., Litovitt T.T. // J.Chem. Phys.V.56. 1972. P.404-412
27. Валиев К.А. // Жур. Оптика и спектр. Т.2. 1963. С.98-103
28. Болдескул А.Е., Погорелов В.Е. // Жур. Оптика и спектр., Т.28. 1970. С.462-464
29. Куйлиев Б.Т., Орлова Н.Д., Позднякова Л.А. // Кювета-термостат высокого давления для изучения спектров комбинационного рассеяния газовых смесей. СамДУ ахборотномаси. №3. 2006. С.54-55
30. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. // Колебательные спектры многоатомных молекул. М.:1970. С.110-114
31. Tanabe K. Hiraishi I. Correction of finite slit width effect on Roman Lene widths spektrochim. Acta 1980 v 36. AP.341-344.

32. Куйлиев Б.Т., Орлова Н.Д., Позднякова Л.А., Тухватуллин Ф.Х., Жумабоев А. Проявление колебательного уширения связанного с дефазировкой, в формировании контура полосы ν_1 в спектрах комбинационного рассеяния метана. Доклады Академии наук Республики Узбекистан. Ташкент 2006-№6 с 17-22
33. Kuyliyev B.T., Orlova N.D., Pozdnyakova L.A. // Profile of the ν_1 Raman Band of Pure CD_4 and its Mixtures with Ar and Kr in the Gas Phase. Journal of Spectroscopy Letters, 2009.V.42, IS.4, P.199-203.
34. Замонавий физиканинг ва астрофизиканинг долзарб муаммолари// III- Республика илмий-амалий анжумани. Қарши 2015.