

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI**

**ALISHER NAVOIY nomidagi
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

FIZIKA FAKULTETI

FIZIKA YO'NALISHI

«OPTIKA VA SPEKTROSKOPIYA» KAFEDRASI

YAXSHIBOYEV QUVONDIQ XOLMUROD O'G'LI

**IZOBUTIL SPIRTI MOLEKULASI KOMBINATSION
SOCHILISH SPEKTRLARINING PARALLEL
VA PERPENDIKULYAR TASHKIL
ETUVCHILARINI O'RGANISH**

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Ilmiy rahbar: f.-m.f.d., prof. A.Jumaboyev

«___» _____ 2015 yil

Bitiruv malakaviy ishi Optika va spektroskopiya kafedrasida bajarildi. Kafedraning 2015 yil _____dagi majlisida muhokama qilindi va himoyaga tavsiya etildi (bayonnoma №___)

Kafedra mudiri:

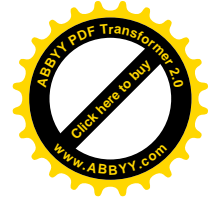
prof. A.Jumabaev

Bitiruv malakaviy ishi YaDAKning 2015 yil «___» _____dagi majlisida himoya qilindi va _____ball bilan baholandi (bayonnoma №___).

YaDAK raisi:

A'zolari:

SAMARQAND – 2015



MUNDARIJA

	Kirish	3
	I BOB. NAZARIY QISM	5
1.1 §	Yorug'likning suyuqliklarda sochilishi	5
1.2 §	Yorug'likning kombinatsion sochilishi va uning tebranish spektrlarida namoyon bo'lishi.....	13
1.3 §	Molekulalararo vodorod bog'lanish va uning turlari	19
1.4 §	Noempirik hisoblashlar va ularning turlari.....	22
	II BOB. TAJRIBA QURILMASI TAVSIFI	27
2.1 §	Tadqiqot obyektini tanlash va moddalarni eksperimentga tayyorlash	27
2.2 §	DFS-52 spektrometrining tuzilishi va ishlash prinsipi.....	29
2.3 §	Kvanto-kimyoviy hisoblashlarni baholash va uning xatoligi.....	32
	III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI	36
3.1 §	Kombinatsion sochilish spektrlarida izobutil spirti molekulasining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarini o'rganish.....	36
	Xulosalar	42
	Adabiyotlar	43



Kirish

Ishning dolzarbligi: Molekyulalararo o'zaro ta'sirlar ichida vodorod bog'lanish alohida ahamiyatga ega. Vodorod bog'lanish energiyasi Van-der-Vaal's o'zaro ta'sir energiyasidan ancha kattaligi ko'rinib turibdi. Vodorod bog'lanish kimyo, fizika, biologiya fanlarida o'zining muhim o'rniga ega. Molekulalararo vodorod bog'lanish hayotning muhim tarkibiy qismi hisoblangan suvning va boshqa suyuqliklarning zarrachalari orasidagi ta'sirini vujudga keltiradi.

Toza suyuqliklar va ularning eritmalarini amaliyotda qo'llanilishi tufayli ularning hossalari chuqur o'rganish zaruriyati paydo bo'ladi. Bizga ma'lumki, suyuqliklar va ularning turli xil eritmaları murakkab sistemalar qatorida turadi, ayni vaqtda suyuqliklarning o'zi murakkab bo'lib, uning tuzilishi, anomal xossalari, molekulalararo vodorod bog'lanishi va molekulyar manzarasi bo'yicha hozirgi kungacha ilmiy tadqiqot ishlari olib borilmoqda. Suyuqliklar va ularning aralashmalari oziq-ovqat va boshqa sanoat tarmoqlarida, shuningdek, organizmlarning faoliyatida ham muhim o'rin egallaydi. Shuning uchun suyuqliklarni o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir. Shu maqsadda biz suyuqliklardan β -pikolin moddasii tanlab oldik.

Malakaviy bitiruv ishining vazifasi: kombinasion sochilish spektrlarida molekulalararo vodorod bog'lanishning namoyon bo'lish xususiyatiga asoslangan holda molekulalararo vodorod bog'lanishni o'rganishga qaratilgan.

Malakaviy bitiruv ishining maqsadi: izobutil spirti molekulalarining kombinasion sochilish spektrlaridagi izotrop va anizotrop tashkil etuvchilarini yorug'likning kombinatsion sochilish spektrlari va noempirik hisoblashlar orqali molekulalararo vodorod bog'lanishning spektral namoyon bo'lishini o'rganish.

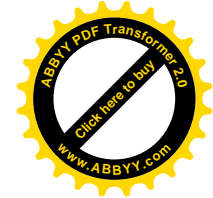
Tadqiqot obyekti: malakaviy bitiruv ishidagi tadqiqotlar izoburil spirti misolida o'tkazildi. Kombinasion sochilish spektrlari va kvanto-kimyoviy hisoblashlar molekulyar agregatlar hosil bo'lish mexanizmlarini tushuntirishda mavjud bo'lgan muammolarni yechish uchun xizmat qiladi.



Tadqiqot usuli: yorug'lining kombinatsion sochilishi va nazariy kvant kimyoviy hisoblashlar.

Tadqiqot ishining ilmiy yangiligi: Izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari bir-biriga mos tushmas ekan, ular orasidagi farq $1,2 \text{ sm}^{-1}$ ni tashkil etar ekan. Izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining mos tushmasligi va perpendikulyar tashkil etuvchisining past chastota tomondan assimetriyaga ega bo'lishi izobutil spirti molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi tufayli suyuqlik tarkibida turli xil agregatlar mavjud bo'lishida ekan. Izobutil spirti molekulasi ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud ekan. Izobutil spirti molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida ochiq strukturali dimer hosil qilar ekan.

Malakaviy bitiruv ishi – kirish, 3 ta bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat bo'lib, ish 46 sahifada bayon qilingan.



I BOB. NAZARIY QISM

1.1 §. Yorug'likning suyuqliklarda sochilishi

Yorug'likning suyuqliklarda sochilishining termodinamika qonunlariga asoslangan fenomenologik nazariyasini Eynshteyn yaratdi. Bu nazariyada suyuqlik uzluksiz muhit deb faraz qilinadi va suyuqlik tuzulishining biror modeliga asoslanmaydi. Shu sababli bu nazariya fenomenologik nazariya deyiladi [1-2]. Sochilish intensivligini topishda faqat zichlik va temperatura fluktuatsiyalari hisobga olinadi. Chunki oriyentatsiya fluktuatsiyasini termodinamika qonunlari asosida hisoblab bo'lmaydi. Molekulalarning issiqlik harakati zichlik fluktuatsiyasiga olib keladi, bu esa dielektrik singdiruvchanlik fluktuatsiyasiga sabab bo'ladi. Bu bog'lanish quyidagicha ifodalanadi:

$$\Delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \Delta\rho \quad (1)$$

bu yerda $\Delta\varepsilon$ - dielektrik singdiruvchanlikning fluktuatsiyasi.

$\Delta\varepsilon$ - ning temperatura fluktuatsiyasiga bog'liq bo'lgan qismi

$$\Delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial T} \Delta T \quad (2)$$

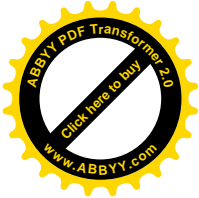
juda kichik bo'lganidan temperatura fluktuatsiyasi tufayli sochilgan yorug'lik intensivligi umumiy intensivlikning 0,1 – 1% ni tashkil etadi. Shuning uchun ham dielektrik singdiruvchanlik fluktuatsiyasining temperatura fluktuatsiyasiga bog'liq qismini hisobga olmaymiz. Faqat zichlik fluktuatsiyasi hisobga olinadi. Agar suyuqlik elektr maydoniga kiritilsa u qutblanadi va dipol momenti

$$P = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} E \quad (3)$$

Biror v hajmning dielektrik singdiruvchanligi

$$\varepsilon^1 = \varepsilon + \Delta\varepsilon \quad (4)$$

bu yerda ε - o'rtacha dielektrik singdiruvchanlik, $\Delta\varepsilon$ - ε - ning fluktuatsiyasi. U vaqtda shu hajmining dipol momenti



$$P = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} E\nu = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} E\nu + \frac{\Delta\varepsilon}{4\pi} E\nu \quad (5)$$

Agar suyuqlikning qutblangan yorug'lik tushayotgan bo'lsa, xar bir molekulada dipol momenti paydo bo'lib, u elektromagnit to'lqinlar tarqata boshlaydi. O'zgaruvchan dipol momentiga ega bo'lgan ν xajmdagi molekulalarning tarqatgan elektromagnit to'lqinlarining r masofadagi nuqtada hosil qilgan elektr maydon kuchlanganligini quyidagicha yozsa bo'ladi:

$$E^{s1} = E^s + \Delta E^s = \frac{\omega^2}{c^2 r} \frac{\varepsilon - 1}{4\pi} \nu E \sin \theta + \frac{\omega^2}{c^2 r} \frac{\Delta\varepsilon}{4\pi} \nu E \sin \theta \quad (6)$$

Bunda θ - radius vektori r bilan dipolning tebranma yo'nalishi orasidagi burchak, (6) ning ikkinchi hadi o'sha nuqtada maydon kuchlanganligining fluktuatsiyasi,

$$\Delta E^s = \frac{\omega^2}{c^2 r} \cdot \frac{\Delta\varepsilon}{4\pi} \nu E \sin \theta, \quad (7)$$

bunga (1) ni qo'ysak

$$\Delta E^s = \frac{\omega^2}{c^2 r} \cdot \frac{E}{4\pi} \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \Delta\rho \right) \nu E \sin \theta \quad (8)$$

Kuchlanganlik fluktuatsiyasi zichlik fluktuatsiyasi bilan xarakterlanadi. Sochilgan yorug'lik intensivligini topish uchun kuzatilayotgan nuqtaga hamma elementlar hajmlardan kelayotgan elektromagnit to'lqinlar maydon kuchlanganliklari fluktuatsiyalarining summasini olib, uni kvadratga ko'taramiz:

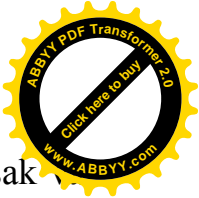
$$\left(\sum \Delta E_i \right)^2 = \frac{\omega^4}{c^4 r^2} \frac{E^2}{16\pi^2} \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \right)^2 \sin^2 \theta \left(\sum \nu_i \Delta\rho_i \right)^2 \quad (9)$$

bu formuladagi $\left(\sum \nu_i \Delta\rho_i \right)^2$ ni topamiz:

$$\left(\sum \nu_i \Delta\rho_i \right)^2 = \nu^2 \sum \Delta\rho^2 i + \nu^2 \sum \Delta\rho_i \Delta\rho_k \quad (10)$$

$\Delta\rho_i$ va $\Delta\rho_k$ lar bir-biriga bog'liq bo'lmagani uchun $\Delta\rho_i \Delta\rho_k = 0$ u vaqtda

$$\left(\sum \nu_i \Delta\rho_i \right)^2 = \nu^2 \Delta\rho^2 N = \nu \Delta\rho V \quad (11)$$



bunda V – umumiy hajm, N – elementlar hajmlar soni. (11) ni (9) ga qo'ysak

$\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{c}{\lambda}$ ni hisobga olsak,

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)^2 \sin^2 \theta v \Delta \rho^2 V \quad (12)$$

Bu yerda $\Delta \rho^2$ ni hisoblasak, quyidagini hosil qilamiz:

$$\overline{\Delta \rho^2} = \frac{\rho^2}{v} \kappa T \chi \quad (13)$$

(13) ni (12) ga qo'ysak.

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4 r^2} \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)^2 \kappa T \chi V \sin^2 \theta \quad (14)$$

Bu qutblangan yorug'lik suyuqlikka tushganda sochilgan yorug'likning intensivligi. Agar tabiiy nur tushayotgan bo'lsa, uni bir-biriga perpendikulyar qutblangan ikki nur deb olib, ularning har biridan sochilgan yorug'liklarning intensivliklarini ko'shsak,

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{2\lambda^4 r^2} \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)^2 \kappa T \chi V (1 + \cos^2 Y) \quad (15)$$

Bu Eynshteyn-Smoluxovski formulasi, bu yerda Y – sochilish burchagi. Bu formula gazlar uchun chiqarilgan formulaga o'xshaydi. (15) dan sochilish va ekstinksiya koeffitsiyentlarini topsak,

$$R = \frac{\pi^2}{2\lambda^4} \kappa T \chi \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)^2 \quad (16)$$

$$h = \frac{16\pi^3}{6\lambda^4} \kappa T \chi \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)^2 \quad (17)$$

Eynshteyn-Smoluxovski formulasini izotrop gazlar uchun chiqarilgan formulaga keltirish mumkin. Ma'lumki,

$$R_r T = P V \quad (18)$$

buni N_A ga bo'lamiz:

$$\frac{R_r T}{N_A} = \frac{P V}{N_A} \quad (19)$$



bundan $KT = \frac{P}{N_1}$. Izotermik siqiluvchanlik $\chi = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{P}$. Bu tengliklarni

hamda

$$\rho = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} = \rho \frac{\partial n^2}{\partial \rho} = 2(n-1) \quad \text{va} \quad n-1 = 2\pi N_1 \alpha$$

ni hisobga olsak,

$$I = I_0 \frac{\pi_2}{2\lambda^4 r^2} \cdot \frac{P}{N_1} 4(n-1)^2 V (1 + \cos^2 Y) \quad (20)$$

bundan

$$I = I_0 \frac{2\pi^2}{\lambda^4 r^2} \frac{(n-1)^2}{N_1} V (1 + \cos^2 Y) \quad (21)$$

Shu formulani chiqarish kerak edi.

Suyuqliklardan sochilgan yorug'likning molekulyar nazariyasini birinchi marta Ramanatan taqdim qildi. U molekulaga ta'sir etuvchi maydonni quyidagi Lorens maydoniga teng deb oldi:

$$I_{\phi\phi} = \frac{\varepsilon + 2}{3} E \quad (22)$$

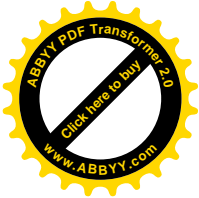
Ikkinchidan molekular o'rtasida oriyentatsion o'zaro ta'sir yo'q, ya'ni molekulaning oriyentatsiyasi boshqa molekularning oriyentatsiyasiga bog'liq emas deb hisobladi. Izotrop zarrachalar uchun Ramanatan nazariyasini ko'rib chiqamiz. Agar suyuqlikka qutblangan yorug'lik tushayotgan bo'lsa, uning elektr maydon kuchlanganligi ta'sirida o'zgaruvchan dipolga ega bo'lib qolgan molekula o'zidan ikkilamchi elektromagnit to'lqinlar socha boshlaydi. Bu molekulaning dipol momenti,

$$P = \alpha \left(\frac{\varepsilon + 2}{3} \right) E \quad (23)$$

Yorug'likning sochuvchi hajmi o'lchovi λ dan kichik bo'lgan elementlar hajmlarga bo'lamiz. Shulardan N zarrachaga ega bo'lgan biror hajmining dipol momenti

$$P_v = \alpha N \left(\frac{\varepsilon + 2}{3} \right) E \quad (24)$$

Shu elementlar hajm sochgan yorug'lik intensivligi quyidagicha bo'ladi:



$$\left(\overline{\Delta \sum E_i^S}\right)^2 = \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon + 2}{3}\right)^2 E \overline{\Delta N^2} \sin^2 \theta \quad (25)$$

Gazlarda $\overline{\Delta N^2} = N$ edi, ammo suyuqliklarda bu tenglik bajarilmaydi. Shuning uchun,

$$\Delta \rho^2 = \kappa T \chi \frac{\rho^2}{v} \quad (26)$$

Tenglikning ikkala tomonini ham zarrachalar massasining kvadratiga bo'lsak, $N = \rho/m$ bo'lganidan,

$$\overline{\Delta N^2} = \kappa T \chi \frac{N^2}{v} = \kappa T \chi N_1^2 v \quad (27)$$

(27) ni (20) ga qo'ysak,

$$\left(\overline{\Delta \sum E_i^S}\right)^2 = \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon + 2}{3}\right)^2 \kappa T \chi N_1^2 v \sin^2 \theta \quad (28)$$

Umumiy intensivlikning topish uchun (28) ni elementlar hajmlar bo'yicha qo'shib chiqamiz:

$$I = I_0 \frac{16\pi^4}{\lambda^4 r^2} \alpha^2 \left(\frac{\varepsilon + 2}{3}\right)^2 \kappa T \chi N_1^2 v \sin^2 \theta \quad (29)$$

Bu yerda $\frac{16\pi^2}{9} N_1^2 \alpha^2 = \frac{(n^2 - 1)^2}{(n^2 + 2)^2}$ - Lorens-Lorens formulasini hisobga olsak,

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{\lambda^4 r^2} \kappa T \chi V (n^2 - 1)^2 \sin^2 \theta \quad (30)$$

Bu qutblangan yorug'lik tushganda izotrop molekulari suyuqlikdan sochilgan yorug'lik intensivligini hisoblash formulasi.

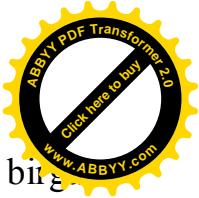
Sochuvchi suyuqlikka tabiiy yorug'lik tushayotgan bo'lsa, sochilgan yorug'lik intensivligi quyidagicha ifodalanadi:

$$I = I_0 \frac{\pi^2}{\lambda^4 r^2} \kappa T \chi V (n^2 - 1)^2 (1 + \cos^2 Y) \quad (31)$$

Bundan sochilish konstantasini topsak,

$$R = \frac{\pi^2}{\lambda^4} \kappa T \chi (n^2 - 1)^2 \quad (32)$$

King-Ramanatan formulasi kelib chiqadi.



Suyuqlik molekullari anizotrop bo'lganda, zichlik fluktuatsiyasi bilan birga anizotropiya fluktuatsiyasini ham hisobga olmoq kerak. Anizotropiya fluktuatsiyasi Ramanatan nazariyasida xuddi gazlarda anizotrop sochilishni topgandagidek hisobga olinadi. Gazlar uchun olganimizda $\left(\overline{\Delta \sum \vec{P}_i \vec{q}}\right)^2$ ning o'rtacha qiymatini topgan edik.

$$\left(\overline{\Delta \sum \vec{P}_i \vec{q}}\right)^2 = \left(\overline{\vec{P}_i \vec{q}}\right) \overline{\Delta N^2} + \overline{\left(\vec{P}_i \vec{q}\right)^2} N - \left(\overline{\vec{P}_i \vec{q}}\right)^2 N \quad (33)$$

(33) ning birinchi hadi zichlik fluktuatsiyasi tufayli sochilishni hisobga oladi. Gazlarda $\overline{\Delta N^2} = N$ edi, suyuqliklarda $\overline{\Delta N^2} \neq N$.

Agar $\overline{\Delta N^2}$ ning qiymatini (27) dan (33) ga qo'yib, birinchi va uchinchi hadlarni guruhlab, ikkinchi xadning o'rtacha qiymatini topib intensivlik formulasini qo'ysak, 90° burchak ostida sochilayotgan yorug'lik intensivligining formulasini hosil qilamiz. Agar $n^2 - 1 = (n^2 + 2) \frac{4\pi}{3} N_1 \alpha$ ni hisobga olsak,

$$I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3}\right)^2 N_1 V \left(\beta \alpha^2 + \frac{7}{45} \gamma^2\right) \quad (34)$$

$$I_{\parallel} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3}\right)^2 N_1 V \frac{6}{45} \gamma^2 \quad (35)$$

Umumiy intensivlik,

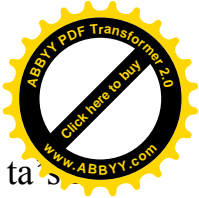
$$I_{90} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3}\right)^2 N_1 V \left(\beta \alpha^2 + \frac{13}{45} \gamma^2\right) \quad (36)$$

Bu yerda $\beta = KTN_1 V$.

Bu formulalar Ramanatan formulalari. (34) va (35) formulalarga asosan Δ ni Ramanatan nazariyasidan suyuqliklarda sochilgan yorug'lik uchun topsak,

$$\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = \frac{\frac{6}{45} \gamma^2}{\beta \alpha^2 + \frac{7}{45} \gamma^2} \quad (37)$$

Bu formula bilan topilgan qutblanish koeffitsiyenti tajriba natijalariga to'g'ri kelmaydi. Ramanatan bu farqni o'zi aytganidek molekullar o'rtasida o'zaro ta'sir yo'q degan faraziga qarshi, molekullar o'rtasida oriyentatsion o'zaro ta'sir



borligidan deb tushuntiradi. Raman bilan Krishnan bu farqni molekulaga ta'sir qiluvchi maydon anizotrop, anizotroplik esa molekullarning sferik emasligidan kelib chiqqan deb tushuntirmoqchi bo'ldi. Shunday qilib, maydon va molekulaning anizotropligini hisoblab chiqdi. Lekin natija tajribaga muvofiq tushmadi. Chunki ular hisoblagan effekt hisobga olmaslik darajada kichik edi. Asosiy sabab molekulalar orasidagi orientatsion o'zaro ta'siridir [3]. Yorug'lik sochilishning molekulyar nazariyasini Anselm ham yaratishga harakat qildi. Uning nazariyasi Ramanatan nazariyasiga asoslanadi, lekin u o'z nazariyasini yaratishda molekulalar o'rtasida orientatsion o'zaro ta'sir mavjud deb hisoblaydi. Uning 90^0 burchak ostida sochilgan yorug'lik intensivligi uchun olgan formulasi quyidagicha:

$$I_{\perp} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3} \right)^2 V \left(\beta\alpha^2 + \frac{7}{45}\gamma^2 + \frac{7}{30}\gamma^2 L \right) \quad (38)$$

$$I_{\parallel} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3} \right)^2 V \left(\frac{6}{45}\gamma^2 + \frac{6}{30}\gamma^2 L \right) \quad (39)$$

Umumiy intensivlik,

$$I_{90} = I_0 \frac{8\pi^4}{\lambda^4 r^2} \left(\frac{n^2 + 2}{3} \right)^2 V \left(\beta\alpha^2 + \frac{13}{45}\gamma^2 + \frac{13}{30}\gamma^2 L \right) \quad (40)$$

Bu yerda L – integral korrelyasion ko'paytuvchi, suyuqliklar tuzilishidagi yaqin tartib bilan xarakterlanadi. L – ni hisoblash uchun suyuqliklarning tuzilishini bilish kerak, lekin suyuqliklar tuzilishi noma'lum. Shuning uchun Anselm nazariyasini tekshirib bo'lmaydi.

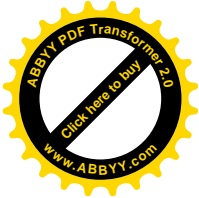
Sochilgan yorug'likning parallel, perpendikulyar, izotrop va anizotrop tashkil etuvchilari orasidagi munosabat. Umumiy sochilish doimiysi izotrop va anizotrop sochilish doimiylari yig'indisini shaklida yozish mumkin: [3]

$$I = I_{iz} + I_{an}$$

yoki

$$R = R_{iz} + R_{an} \quad (41)$$

Izotrop molekula uchun $\Delta=0$. Anizotrop molekullari suyuqliklar uchun $\Delta = 6/7$. Shuning uchun tajribada o'lchangan intensivlik,



$$I_{\parallel} = \frac{6}{13} I_{aH}, \quad I_{\perp} = I_{u3} + \frac{7}{13} I_{aH} \quad (42)$$

Bundan

$$\Delta = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}} = \frac{\frac{6}{13} I_{aH}}{I_{u3} + \frac{7}{13} I_{aH}} \quad (43)$$

Demak,

$$I_{aH} = I_{u3} \frac{13\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (44)$$

Umumiy intensivlik,

$$I = I_{u3} + I_{aH} = I_{u3} + I_{u3} \frac{13\Delta}{6 - 7\Delta} = I_{u3} \left(1 + \frac{13\Delta}{6 - 7\Delta} \right) = I_{u3} \frac{6 + 6\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (45)$$

$$I = I_{u3} \frac{6 + 6\Delta}{6 - 7\Delta}, \quad R = R_{u3} \frac{6 + 6\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (46)$$

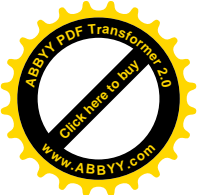
Bu formuladagi R_{iz} ning Eynshteyn-Smoluxovskiy formulasidan qiymatini keltirib qo'ysak,

$$R = R_{u3} \frac{6 + 6\Delta}{6 - 7\Delta} = \frac{\pi^2}{2\lambda^4} \kappa T \chi_T \left(\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_T \frac{6 + 6\Delta}{6 - 7\Delta} \quad (47)$$

Bu, Δ ni hisobga olgan holdagi Eynshteyn-Smoluxovskiy formulasi.

1.2 §. Yorug'likning kombinatsion sochilishi va uning tebranish spektrlarida namoyon bo'lishi

Molekular orasidagi masofa yaqin bo'lganda gazni suyuqlikka aylanishida va molekulyar kristallar hosil bo'lishida molekulararo o'zaro ta'sir muhim ahamiyatga ega bo'ladi. Molekulararo o'zaro ta'sir kuchlari ko'p hollarda Van-der-vals kuchlari ham deyiladi, shu kuchlar tufayli moddalarning suyuq holati vujudga keladi [4-6]. Savol tug'iladi, nima sababdan elektrik nuqtai nazardan neytral bo'lgan molekular o'zaro bir-biriga tortiladi. Bu savolga javob berish uchun dastlab qutbli molekularni qaraymiz. Qutbli molekularada musbat va manfiy zarrachalarning og'irlik markazlari bir-biriga nisbatan siljigan va turli molekularadagi qarama-qarshi zaryadlar bir-birini elektrostatik (kulon) kuchlari



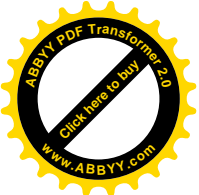
tufayli tortadi. Bunda molekularlar rasmdagidek ketma-ket yoki antiparalel joylashadi.

Tebranish spektrida molekularlarning spektral parametrlari deganda, IQ yutilish yoki kombinatsion sochilish chizig'ining chastotasi, polosaning yarim kengligi, intensivligi tushuniladi [4]. Modda bir agregat holatdan boshqa, bir agregat holatga o'tganda moddani tashkil etgan molekularlarning spektral parametrlari ma'lum miqdorda o'zgaradi. Modda siyraklashtirilgan gaz holatida bo'lganda molekularni tashkil qilgan atomlarning tebranma harakatidan tashqari molekularning aylanma harakati ham sodir bo'ladi. Shuning uchun IQ sohada molekularlarning tebrama-aylanma spektri kuzatiladi. Molekularning tebranma aylanma spektrlari ajrata olish qobiliyati yuqori bo'lgan asboblarda yordamida yozilganda tebranma-aylanma sathlar orasida o'tishlarga mos keluvchi chiziqlar yaqqol ko'rinadi.

Vodorod bog'lanishni o'rganishda to'liq spektroskopik ma'lumotni infraqizil yutilish hamda kombinatsion sochilish spektrlarini birgalikda qo'llagandagina olish mumkin. Bu ikki usul tebranish spektrini o'rganishda bir-birini to'ldiradi. Tanlash qoidasiga ko'ra, yuqori simmetriyaga ega bo'lgan molekularlarda infraqizil yutilish spektrida kuzatiladigan kombinatsion sochilish spektrida kuzatiladigan tebranishlar IQ yutilish spektrida kuzatilmaydi [5].

Bundan tashqari past chastotalardagi tebranishlarni yorug'likni kombinatsion sochilish usuli bilan o'rganish qulay. Umuman olganda vodorod bog'lanishni o'rganishning juda ko'p usullari mavjud. Masalan, yorug'likning molekulyar sochilishi, ultraakustik usul, yadro magnit rezonans usuli va hokoza. Lekin bu usullar vodorod bog'lanish haqida IQ yutilish va KS usullari beradigan to'liq ma'lumotni bera olmaydi [5]. Vodorod bog'lanish tebranma spektrida A-N valent tebranish polosasining past chastotalarga tomon siljishiga olib keladi. Qo'shni molekularlarning proton donorlik va proton akseptorlik qobiliyatlariga qarab siljishning kattaligi 10 cm^{-1} dan minglab cm^{-1} gacha o'zgaradi [5].

Chastota siljishi bilan asosiy holda valent tebranishlari chiziq intensivligining oshishi ham vodorod bog'lanishning maksimum belgisi bo'la

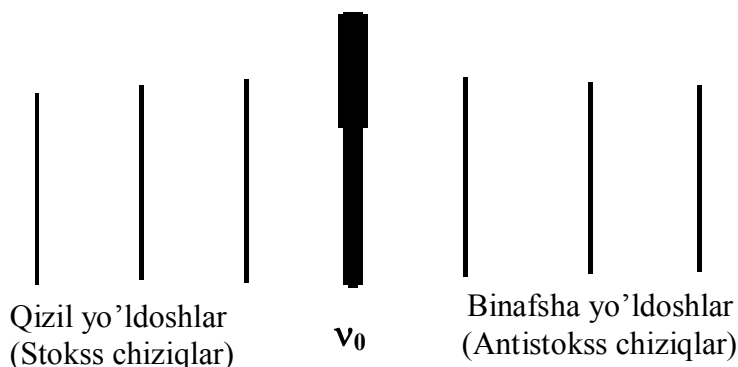


oladi. Kuchsiz vodorod bog'lanishlar bir qator sistemalarda masalan, tarkibida proton donor sifatida xloroform tiol bo'lganda vodorod bog'lanish mavjudligini ν A-N polosaning siljishiga qaraganda intensivlik tezroq ko'rsatadi. Haqiqatdan agar tipik vodorod bog'lanishlar uchun nisbiy siljish 10% dan oshmasa, ν A-N polosaning intensivligi bir necha marta oshadi [6].

Oddiy sharoitda valent tebranish chiziqlarining kengayishi vodorod bog'lanishlarning yana bir belgisi qaraladi. Ko'pincha bu kengayish bilan baravariga proton donori chiziqlarida murakkab struktura ham paydo bo'ladi. Barcha sistemalar uchun ham qo'llanilishi mumkin bo'lgan chiziqlarning kengayishini to'liq tushuntiruvchi umumiy nazariyalarning bo'lishi mumkin emasligi ravshan, chunki vodorod bog'lanishli sistemalar juda xilma-xil. Shuning uchun ham turli xil vodorod bog'lanishlarda ayniqsa turli agregat holatlarda kengayish sabablari haqida o'ylash tabiidir.

Vodorod bog'lanishlarning deformatsion tebranishlarda ko'rinishini muntazam tekshirishga bag'ishlangan ishlar ko'r emas. Chunki ular keskin ajralib, namoyon bo'lmaydi. Odatda bu tebranishlar chiziqlarida yuqori chastotali siljish va intensivlikning ozgina o'zgarishi qayd qilinadi.

Yorug'likning molekulyar sochilishida tushuvchi nurning to'lqin uzunligiga sochilgan yorug'likning to'lqin uzunligi bilan mos tushadi. Lekin 1928 yilda rus olimlari L.I. Mandelshtam, T.S. Landsberg va hind olimi Ch.V. Raman ko'rsatdilar ki, yorug'lik sochilishining shunday turi mavjudki [7-8], sochilgan yorug'lik spektrida tushuvchi monoxromatik to'lqinni xarakterlovchi spektral chiziqlardan tashqari har bir monoxromatik spektral chiziqning ikkala tomonida joylashadigan qo'shimcha spektral chiziqlar ham hosil bo'ladi. Faraz qilaylik suyuqlikka tushuvchi nurning chastotasi ν^0 bo'lsin (1-rasm). Qo'shimcha hosil bo'lgan yo'ldoshlar chastotasini ν^I ν^{II} ν^{III} bilan belgilaymiz. Tushuvchi nur chastotasi bilan har bir yo'ldosh chastotasi o'rtasidagi farq yorug'lik sochuvchi modda uchun xarakterli bo'lib bu farq ana shu modda molekularining xususiy xususiy tebranishlar chastotasiga tengdir.



1-rasm

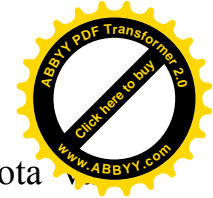
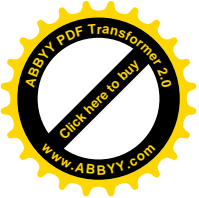
$$\begin{aligned}
 \Delta v_1 &= v_0 - v' = \pm v_{1i} \\
 \Delta v_2 &= v_0 - v'' = \pm v_{2i} \\
 \Delta v_3 &= v_0 - v''' = \pm v_{3i}
 \end{aligned}
 \quad \} \quad (46)$$

Tajriba ko'rsatdiki, bu shartlar hamma vaqt ham bajarilmaydi. Kombinatsion sochilishda kuzatiladigan yo'ldosh infraqizil nurlanishda yoki infraqizil yutilish sohasida hamma vaqt hosil bo'lmaydi. Bunga sabab bu kombinatsion sochilish spektrini hosil bo'lishi uchun modda molekulasining qutblanuvchanligi α o'zgarishi kerak. Infraqizil yutilish spektrlar hosil bo'lishi uchun modda molekulasining dipol momenti o'zgarishi kerak. Shuning uchun ham infraqizil yutilish spektrida hosil bo'ladigan ba'zi chiziqlar kombinatsion sochilish spektrida kuzatilmaydi va aksincha [5,7,9].

Yorug'likning kombinatsion sochilish hodisasini soddalashtirilgan kvant nazariyasi asosida quyidagicha tushuntirish mumkin. Odatdagi sharoitda modda molekulasining aksariyati uyg'onmagan holatda bo'ladi. Ana shunday holatdagi molekulalarga

$$\epsilon = h\nu \quad (47)$$

formula bilan aniqlanadigan kvant energiyaga ega bo'lgan tushganda, bu kvant o'z energiyasining bir qismini molekulaga beradi va natijada chastotasi kichik va to'liq uzunligi katta bo'lgan kvantga aylanadi, ya'ni bu holda qizil yo'ldoshlar hosil bo'ladi. Ikkinchi holda kvant uyg'ongan molekula bilan uchrashadi, bu holda

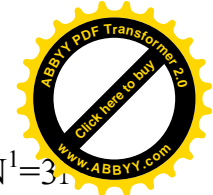
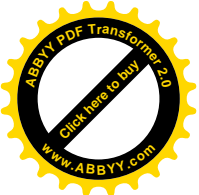


molekula o'z energiyasining bir qismini kvantga beradi. Natijada chastota energiyasi katta bo'lgan va to'lqin uzunligi kichik bo'lgan kvant, ya'ni binafsha yo'ldoshlar hosil bo'ladi [7-9]. Odatdagi sharoitda binafsha yo'ldoshlar intensivligi qizil yo'ldoshlar intensivligidan kichik bo'ladi. Bunga sabab shundan iboratki moddaning uyg'onmagan atom va molekulalar soni uyg'ongan atom va molekulalar sonidan ko'p bo'ladi.

Temperaturaning oshishi bilan binafsha yo'ldoshlar intnsivlig tez oshadi. Bunga sabab shundan iboratki, bu holda moddaning uyg'ongan atom va molekulalar soni temperatura oshishi bilan tez oshadi. Qizil yo'ldoshlar intensivligi temperaturaning oshishi bilan sezilarli o'zgarmaydi yoki biroz kamayadi.

Yorug'likning kombinatsion sochilish mumtoz nazariyasini rus olimlari G.S. Landsberg va L.I. Mandelshtam yaratdilar [4]. Bu nazariyaning mohiyat quyidagidan iborat. Yorug'likning elektr maydon kuchlanganligi (E) ta'siri ostida molekula ichidagi elektronlar tebranib molekula kattaligi $P=\alpha E$ ga teng bo'lgan dipol momentiga ega bo'ladi. Mumtoz nuqtai nazarga asosan molekulaning qutblanuvchanligi α uni atom yadrolarining oniy vaziyati bilan aniqlanadi. Yadrolarning o'zi tinch turmasdan bilki tartibsiz harakatda bo'ladi. Shu sababli qutblanuvchanlik doimiy qolmasdan balki vaqt bo'yicha o'zgaradi. Buni chastotalari atom yadrolarining tebranishi bilan aniqlanadigan garmonik tebranishlarning ustma-ust tushishi ko'rinishida tasavvur etish mumkin. Bu chastotalar molekulaning xususiy infraqizil chastotasi bilan mos tushadi. Natijada induksiyalangan dipol momentlarining (R) modulyasiyasi yuzaga keladi. Agar tashqi elektr maydoni E vaqt bo'yicha ν chastota bilan garmonik qonun bilan o'zgarsa u holda R dipol momentining tebranishlarida $\nu \pm \nu_{inf}$ kombinatsion chastotalar hosil bo'ladi. Xuddi shunday chastotalar bu dipol momentlarning nurlanishlarida ya'ni sochilgan yorug'liklarda ham hosil bo'ladi [7, 8].

Bu bayon etilgan mulohazani matematik usulda quyidagi ko'rinishda ifodalash mumkin. Agar molekuladagi yadrolar soni N ga teng bo'lsa, u holda bu molekulalarning erkinlik darajasi $3N$ ga teng bo'ladi. Bundan uchta ilgarilanma



va yana uchasi molekulaning aylanma harakatiga tegilshi bo'ladi. Qolgan $N^1=3$ 6 erkinlik darajalari molekula yadrolarining ichki harakatiga ya'ni tebranma harakatiga mos kladi. Yadrolarning ichki harakatini tavsifi uchun N^1 koordinatalar ya'ni $q_1, q_2, q_3, q_4, \dots, q_N$ kerak bo'ladi. Yadro muvozanat holatida bo'lganda barcha koordinatalar nolga teng. Muvozanat holatidan ozroq chetlashganda issiqlik harakati paytida har ibr q koordinata erkin garmonik tebranishda bo'ladi. Bunday tebrinish uchun

$$q = a \cos(\Omega_u t + \delta) \dots \quad (48)$$

uning infraqizil astotasi Ω ga teng bo'ladi va xaotik ravishda o'zgaradigan δ fazaga ega bo'ladi. Tebranishni kichikligi tufayli qutblanuvchanlik tenzori α ni qatorga yoyib q ni birinchi darajali hadlari bilan kifoyalanish mumkin, soddalik uchun α ni skalyar deb qabul qilamiz:

$$\alpha = \alpha_0 + \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) q \dots \quad (49)$$

Agar bu tenglikni e'tiborga olsak

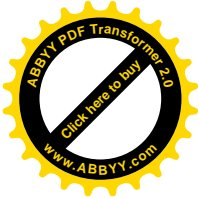
$$\alpha = \alpha_0 + \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) a \cdot \cos(\Omega_u t + \delta) = \alpha_0 + \frac{1}{2} \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) a \cdot e^{i(\Omega_u t + \delta)} + \frac{1}{2} \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) a \cdot e^{-i(\Omega_u t + \delta)} \quad (50)$$

$$E = E_0 \cdot e^{i\omega t} \dots \quad (51)$$

Natijada molekulaning dipol momenti quyidagicha aniqlanadi.

$$P = \alpha_0 E_0 e^{i\omega t} + \frac{E_0}{2} \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) a \cdot e^{i[(\omega + \Omega_u)t + \delta]} + \frac{E_0}{2} \sum \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right) a \cdot e^{i[(\omega - \Omega_u)t - \delta]} \dots \quad (52)$$

Bu tenglikdan ko'rinadiki sochilgan nurlanishda faqat tushuvchi nur chastotasi ω ga ega bo'lgan yorug'lik emas, balki $\omega \pm \Omega_u$ kombinasiyaga ega bo'lgan chastotali yorug'lik nurlari ham hosil bo'ladi. Alohida molekulalar tomonidan sochiladigan to'lqinlar o'zaro kogerentemas, chunki yadrolarning tebranishlarni issiqlik uyg'onishida va bir molekuladan ikkinisiga va bir tebranishdan ikkinchisiga o'tishidan fazalar δ o'zgarishi davriy bo'lmaydi. Qizil va binafsha yo'ldoshlarning intensivligklari o'rtasida kvant nazariyasiga asosan quyidagicha bog'lanish mavjud.



$$I_{\text{кизил}} = I_{\text{бинафша}} \exp\left(\frac{\eta\hbar|\Omega_{nm}|}{kT}\right) \quad (53)$$

$$\Omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\eta} \quad (54)$$

bunda E_n va E_m molekula foton bilan to'qnashganda uni n ni sathdan m sathga o'tishdagi energiyalarini ifodalaydi $E_n > E_m$ bo'lsa binafsha yo'ldosh hosil bo'ladi. $E_n < E_m$, bo'lsa qizil yo'ldosh hosil bo'ladi. bunda N_n, E_n

$$\frac{I_{\text{кизил}}}{I_{\text{бинафша}}} = \frac{N_n}{N_m} \quad (55)$$

sathdagi molekular soni, N_m – esa E_m sathdagi molekular sonidir. Optikada spektr deb biror manbaning nurlanishini ifodalovchi monoxromatik tebranishlar chastotalarining yig'indisiga aytiladi. Spektr grafik usulda nurlanish intensivligining chastota bo'yicha taqsimlanishi ko'rinishida ifodalanadi. Spektr asosan uch xil bo'ladi.

- 1). Yalpi yoki tutash spektr
- 2). Chizikli yoki diskret spektr
- 3). Yo'l-yo'l spektr

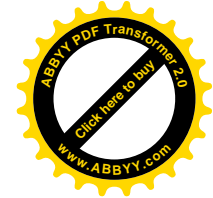
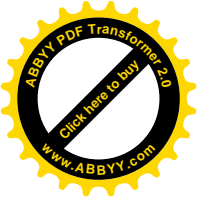
Yalpi spektrni qattiq jismlarni qizdirganda hosil qilish mumkin. Chizikli spektrni gazlar yoki bug'lar hosil qiladi. Yo'l-yo'l spektr suyuqliklarda hosil bo'ladi.

Agar spektral chiziqning kengligi tebranishning so'nishi natijasida yuzaga kelsa, bunday kenglikka spektral siziqning tabiiy kengligi deyiladi va $I(\omega) = \frac{I}{2} I_{max}$ mos keluvchi spektral chiziqni kengligiga uning yarim kengligi deyiladi. Keltirilgan va ifodalarga asosan

$$\frac{I_0}{\pi\gamma} = I_0 \frac{\gamma}{2\pi} \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{\gamma^2}{4}} \quad (56)$$

Bundan
$$\omega_{,2} = \omega_0 \pm \frac{\gamma}{2} \quad (57)$$

Shunday qilib spektral chiziqning chastota shkalasidagi kengligi



$$\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 = \gamma = \frac{2q^2\omega^2}{3mc^3} \quad (58)$$

Hisoblashlar ko'rsatadiki ko'zga ko'rinadigan yorug'lik nurining to'lqin uzunligi $\lambda=500$ nm bo'lganda chastota shkalasidagi spektral chiziqning tabiiy kengligi $\Delta\nu_{mao} \approx 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ga teng bo'ladi. To'lqin uzunligi shkalasidagi spektral chiziqning tabiiy kengligi

$$\Delta\lambda_{mao} = (2\pi/\omega^2) \Delta\omega = 1,17 \cdot 10^{-4} \text{ \AA} \quad (59)$$

Atomlarning to'qnashishi natijasidagi kenglik $R=1\text{atm}$. $T=292$ K ga teng bo'lganda $\Delta\nu_{mao} = 5 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ bo'ladi. Bundan tashqari Dopler samarasi natijasida ham spektral chiziq kengayadi. Bunday kengayish kattaligi quyidagi formula yordamida aniqlanadi

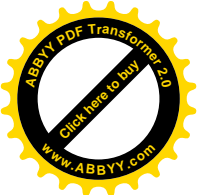
$$\Delta\nu_D = \lambda(2kT/m)^{1/2} \sin\theta \quad (60)$$

bunda θ sochilish burchagi. Gazlarda $\Delta\nu_D = 6,6 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. Demak spektral chiziqning Doplercha kengayishi uni tabiiy kengayishidan yuzlab marta katta bo'lar ekan.

Agar spektral chiziq konturida intensivlikni taqsimlanishi quyidagi formulaga bo'ysunsa bunday konturga Lorens konturi deyiladi.

$$I = I_0 \frac{(\gamma/2)^2}{(\gamma/2)^2 + x^2} \quad (61)$$

Bunda x – kontur markazidan boshlab hisoblanadigan masofa. Atomlar bir-biri bilan to'g'nashganda tebranishlar yutilish tufayli so'nadi. Tebranishni yutuvcha har bir atomni ulushi spektral chiziq konturining barcha qismlarida bir xil bo'lsa, bunday kengayishga bir jinsli kengayish deyiladi. Bunday kengayishga tabiiy va loorenscha kengayishni misol qilib ko'rsatish mumkin [10-11]. Bir jinsli kengayishda har bir atoga mos keladigan nurlanish chizig'ining shakli bilan o'zaro mos tushadi. Agar bu shart bajarilmasa kengayish bir jinsli bo'lmaydi.



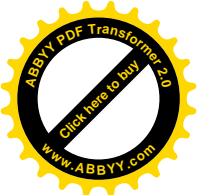
1.3 §. Molekulalararo vodorod bog'lanish va uning turlari

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan yana biri vodorod bog'lanishlardir. Agar vodorod atomi molekuladagi kuchli elektromanfiylikka ega bo'lgan atom bilan kimyoviy birikkan bo'lsa, u boshqa molekulaning yoki xuddi shu molekulaning boshqa manfiy zaryadli atomi bilan yana bir qo'shimcha bog'lanishlar hosil qiladi. Lekin bu ikkinchi bog'lanish oddiy bog'lanishga qaraganda bo'shroq bo'ladi. Bu turdagi bog'lanishga vodorod bog'lanish deb nom berilgan. Vodorod atomining bir vaqtning o'zida ikki bog'lanish hosil qilish qobiliyati XIX asrning oxirida aniqlangan edi. Vodorod bog'lanish shartli ravishda $A-H...B$ deb belgilanadi. Bunda $A-H$ bog'lanishdagi elektronlarning zichligi, A atomiga tomon kuchli siljigan bo'ladi. Buning natijasida vodorod atomi yaqinida elektronlar juda siyrak bo'ladi, ya'ni yalong'ochlangan protonning yakka o'zi qoladi va ajoyib xususiyatga ega bo'ladi. Shuning uchun ham vodorod ioni boshqa molekulalarning manfiy zaryadli B atomiga tortiladi. Boshqa atomlar esa B ga yaqinlashganda itarishadi, chunki B ning manfiy zaryadi bilan molekulalarning elektron qobig'i ta'sirlashadi [12–14].

O'zaro ta'sirlashuvchi atom B ning manfiy zaryadi qancha katta bo'lsa, o'lchami qancha kichik bo'lsa va $A-H$ kovalent bog'lanishda qatnashuvchi atomlarning manfiy zaryadlaridagi farq qancha katta bo'lsa vodorod bog'lanish shuncha kuchli namoyon bo'ladi. Shuning uchun u ftor bilan kislorod birikmalarida eng kuchli bo'ladi, azotda kamroq, xlor bilan oltingugurtda yana xam kamroq bo'ladi. $A-H...B$ o'zaro ta'sirning kuchiga qarab N bog'lanishning energiyasi ham o'zgaradi.

Masalan, ftorli birikmalarda bu bog'lanish energiyasi 10 kkal/mol ni tashkil qilsa, $A-H...B$ tipdagi komplekslarda 2-3 kkal/mol ni tashkil qiladi. Shunday qilib spetsifik o'zaro ta'sir bir yoki turli xil molekulalarning ikkita funktsional guruppasini o'z ichiga oladi.

Bu guruhlardan biri $A-H$ proton beruvchi, ikkinchisi B esa proton qabul qiluvchi deyiladi. Odatda donor proton sifatida gidroksil guruhlari ($O-H$)



aminoguruhlar (N-H) bo'ladi. Aktseptor esa karbonil guruhlaridagi ftor, xlor hako-zolar bo'lishi mumkin.

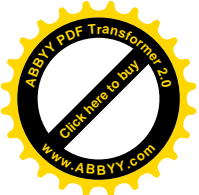
Agar vodorod bog'lanish A-H va B guruhlarida bir turli va har turli ikki yoki undan ko'proq molekulalar orasida yuz bersa, buni molekulalararo vodorod bog'lanish deyiladi. Vodorod bog'lanish bir birikma molekulalar orasida ham yuz beradi. Bunday bog'lanishni ichki molekulyar vodorod bog'lanish deyiladi.

Molekulalararo vodorod bog'lanishlar turli tarkibdagi qo'shilmalarning hosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Vodorod bog'lanishning eng ko'p turi ayni bir birikmaning ikki molekulasida bog'lanishlardan iborat. Hosil bo'lgan komplekslar dimerlar deyiladi. Bundan tashqari bir vaqtning o'zida bir necha bir xil yoki har xil molekulalar vodorod bog'lanish orqali o'zaro bog'lanishi mumkin. Ular trimer, tetramer va hako-zo bo'lishi mumkin. Molekulalararo vodorod bog'lanish ko'pchilik organik birikmalar uchun xosdir. Masalan, kislorod nitrofenolda ichki molekulyar vodorod bog'lanish bor. Paranitrofenolda esa molekulalararo bog'lanish, chunki bu birikmalar O-H guruhining vodorodi nitroguruhi kislorodidan uzoqlashadi [14].

Vodorod bog'lanish ko'pgina fizik, ximik, biologik jarayonlarda muhim rol o'ynaydi. Hamda moddaning ko'pgina xossalari belgilaydi. Bu bog'lanish vodorod atomi bo'lgan deyarli hamma moddaning har qanday agregat holatida uchraydi. Keyingi yillarda vodorod bog'lanish haqidagi fikrlardan foydalangan yangi sohalar vujudga kelmoqda va taraqqiy etmoqda. Masalan, absorbsiya, kataliz, fermentlar aktivligi va hako-zo.

Vodorod bog'lanish tirik organizmda ham namoyon bo'ladi. Inson o'zi ham vodorod bog'lanishli birikmalardan tashkil topgan. Tirik organizmdagi murakkab molekulalarning tuzilishi va xossalari ko'p hollarda molekulalar ichidagi bog'lanishlarga bog'liq bo'ladi. Bitta katta molekula ichida bunday bog'lanishlardan bir nechtasi bo'lishi mumkin [14].

Haqiqatdan ham bu bog'lanishlarda oqsil va nuklein kislotalar tuzilishida o'ziga xoslikni aniqlaydi va sintetik polimerining ko'pchiligida muhim rol o'ynaydi. Toza moddada yoki eritmada molekulalararo vodorod bog'lanishlarning hosil bo'lishi moddaning ko'p fizikaviy xossalari o'zgarishiga olib keladi.



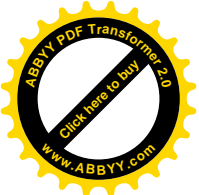
Moddalaming tuzilishini, molekulyar qo'shilmalaming hosil bo'lishiga sabab bo'luvchi o'zaro ta'sir kuchlari to'liq aniqlaydi. Moddalar qo'shilishida ularning xossalari odatda kuchli o'zgaradi va qo'shilishdan oldin hosil bo'lgan moddalaming xossalari ancha farq qiladi. Chunki vodorod bog'lanish molekularning faqat massasi, o'lchamlari va shakliga emas, funksional guruhlarining elektron tuzilishini ham o'zgartiradi. Boshqacha aytganda, vodorod bog'lanish tufayli moddaning termodinamik va elektr xossalari o'zgaradi. Ko'p xollarda erish va qaynash haroratining ko'tarilishi, bug' hosil bo'lish issiqligining kuzatilishi, ideal eritma va elektr o'tkazuvchanlikning, dielektriklar xossalarining o'zgarishi, gaz qonunlarida chetlanish kabi xodisalarni ko'rish mumkin. Bundan tashqari moddaning spektroskopik parametrlari ham o'zgaradi. Bu esa infraqizil yutilish va kombinatsion sochilish spektrida chastotalarning siljishiga va YaMR spektrida esa signallarning siljishiga olib keladi.

Vodorod bog'lanishning hosil bo'lishi tebranish spektrida yaqqol namoyon bo'ladi. Vodorod bog'lanish tufayli past chastotali uzoq infraqizil yutilish oblastida yotuvchi molekularning tebranishlariga mos keluvchi yangi chiziqlar paydo bo'ladi.

Demak, vodorod bog'lanish molekulararo o'zaro ta'sirlarning bir turi bo'lib, uni bir molekulaning vodorod atomi bilan ikkinchi molekulaning xuddi shu molekulaning manfiy zaryadli atomlari hosil qiladi. Agar ayni bir molekulaning ichida aytilgan o'zaro ta'sir mavjud bo'lsa, bunga ichki molekulyar vodorod bog'lanish deyiladi.

Agar o'zaro ta'sirda turli molekular qatnashsa u vaqtda molekulyar vodorod bog'lanish hosil qiladi.

Vodorod bog'lanish muammolari uning spektral namoyon bo'lish masalalari doirasi juda keng bo'lib, ko'p ilmiy ishlarda ko'rib chiqilgan. Vodorod bog'lanish energiyalari keng oraliqni egallaydi. Ular elektron tebranish va aylanish spektrlarida namoyon bo'ladi. Ularni o'rganish infraqizil yutilish hamda kombinatsion sochilish spektri va YaMR spektrlari yordamida olib boriladi [12-14].

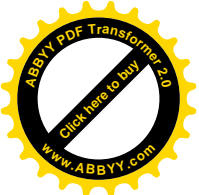


1.4 §. Noempirik hisoblashlar va ularning turlari

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'yektlar uchun, vodorod bog'lanish va Van-dyer-vaals molyekulalararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molyekulyar agryegatlarni o'rganishda yangi eksperymental tadqiqotlar va kvanto-ximik hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning "spektri, tuzilishi va xossalari" orasidagi bog'lanishlarni o'rnatish hamda molyekulalararo o'zaro ta'sirlarni, molyekulalar agryegatlanishini va ularni o'rab turgan muhitning molyekulaning spektral parametrlariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega.

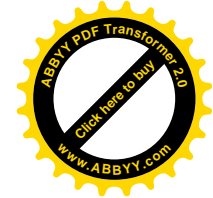
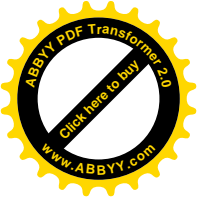
Amaliy masalalarni noempirik hisoblashlar o'tkazish orqali hal qilish jarayonida quyidagi masalalarga e'tibor qaratish talab etiladi. Tayyor dasturlar asosida o'tkaziladigan noempirik hisoblashlar usulini tanlab olish. Molyekulaning tyermodinamik va spektroskopik parametrlarini aniqlaydigan zamaonaviy noempirik hisoblashlarning aniqlik darajasi. Molyekulyar tuzilishini o'rganishda va amaliyotda hisoblashlar natijalaridan foydalanish darajasi. Kvanto-kimyoviy hisoblashlar bilan spektroskopik usullar bir-birini to'ldirgan holda o'rganilayotgan ob'jekt to'g'risida to'liq ma'lumot olish imkoniyatini yaratadi. Umumiy qilib aytganda, noempirik hisoblashlar taklif qilingan modyelning o'lchangan natijalar bilan adyektivatligini ta'minlash uchun molyekulyar sistyemalarda ma'lum bir yaqinlashishlar orqali Shryedinyer tyenglamasining yechimini topish jarayoni dyeb qarash mumkin. Noempirik hisoblashlarning kelb chiqish tarixiga bir nazar tashlasak, bu sohada o'tgan asrning o'rtalarida rivojlanish bosqichiga o'tganligini guvohi bo'lamiz. Bu soha atom va molekula tuzilishi to'g'risidagi fundamental bilimlar Plankning nurlanishning kvantlanishi haqidagi g'oyasidan keyin bu sohada yangi bosqich paydo bo'ldi.

Atom va molekular tuzilishi to'g'risidagi muammolar kvant mexanikasida De-Broyl, Shredinger, Diran va boshqalarning ishlaridan keyin juda tez rivojlandi. Kvant mexanikasi yadro-elektron sistemalar tuzilishini aniqlash va ular xossalari hisoblash usullarini yaratilishiga asos bo'ldi. Molekulalarda elektron va yadrolar



harakatini ajratish Born va Oppengeymer (1927) va boshqalarning ishlariga asoslab berildi. Murakkab molyekulyar tuzilmalarning va effyektlarning xossalari hisoblash uchun ko'pincha noempirik hisoblashlar – «ab initio» (lotinchadan «Boshlang'ich») qo'llaniladi.

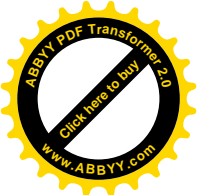
Noempirik usul - tajriba natijalaridan foydalanmagan holda atom va molekularning energetik sathlari va to'lqin funksiyasini aniqlashga imkon beruvchi Shryodinger tenglamasini biror yaqinlashishda yechish usullari orqali amalga oshiriladi. Bu usullar yordamida berilgan elektronlar soniga asoslanib, sistemaning kvant-mexanik holati aniqlanadi. Molekuladagi hisoblashlar adiabatik yaqinlashishda amalga oshiriladi, ya'ni energiya va to'lqin funksiyasini aniqlash masalalari yadrolarning fazodagi belgilangan holati bo'yicha alohida-alohida yechiladi. Bu usullar turli xil masalalar uchun turlicha shaklga ega bo'lishi mumkin [15]. Misol uchun, molekulada teng og'irlikdagi yadro konfiguratsiyalari uchun dipol momenti, elektron uyg'onish energiyasi yoki elektronlar zichligini hisoblash uchun bitta elektron masalani yechish kifoya qiladi. Molekuladagi yadrolarning teng og'irlikdagi konfiguratsiyasini aniqlash uchun esa, sirt potensial energiyasining minimumini topish kerak bo'ladi, bu esa har bir nuqta bo'yicha turli xil yadro konfiguratsiyalari uchun elektron masalani bir necha marta yechishni talab qiladi. Nisbatan to'liq hisoblashlar quyidagi sxema bo'yicha amalga oshiriladi. Tadqiq qilinayotgan obyektning elektron holati aniqlanadi va har bir holat yoki holatlar sistemasi hisoblashlar bazisini hosil qiluvchi orbitallar beriladi. Elektron energiyasi va tulqin funksiyasi hisoblanadigan molekula yadrolarning geometrik konfiguratsiyalari to'plami ajratib olinadi. Masalan NSI molekulasining dissosiasiya energiyasini topish uchun eng kamida teng og'irlikdagi atom yadrosi va yetarlicha katta bo'lgan ikkita masofa uchun elektron masalani yechish kerak. Hisoblashlar jarayonida, misol uchun teng og'irlikdagi izomerlar yoki o'tishlar holatlarini qidirishda, yadrolarning geometrik konfiguratsiyalari to'plami o'zgarishi mumkin. Har bir yadro konfiguratsiyalari uchun quyidagi umumiy ko'rinishdagi molekulyar integrallar hisoblanadi:



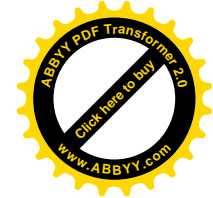
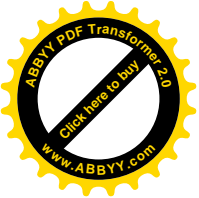
$$\int \varphi_a(1) \tilde{A}(1) \varphi_b(1) d\tau_1 \text{ qisqacha ko'rinishda } \left\langle \varphi_a \left| \tilde{A} \right| \varphi_b \right\rangle$$

Bu yerda, A - bir elektronli operator. Bu integrallar har bir elektron holat energiyasini baholash va molekulyar orbitallarni topish imkonini beradi. Bundan keyin, variasion usullar yordamida elektronlar harakatining muvofiqlashtirilganligi – elektron korrelyasiyani hiobga olgan holda ma'lumotlar aniqlashtiriladi. Buning uchun esa, valent bog'lanishlar usuli ishlatiladi. Olingan ko'p elektronli to'lqin funksiyasi molekula xossalarini, misol uchun dipol yoki kvadrupol momentlari, qutblanganligini va boshqalarni hisoblash imkonini beradi [16]. Ushbu keltirilgan hisoblashlar amalga oshirilgandan keyin molekulalarning har bir elektron holati uchun yadrolarning teng og'irlikdagi geometrik konfiguratsiyalari topiladi. Bu holatlar uchun tenglamalar yechimlari to'g'risidagi nazariya keyingi paragrafda batafsil keltirilgan. Hozirgi kunda noempirik hisoblash usullari molekula tuzilishi va o'zaro joylashishi hamda ularning elektromagnit nurlanish bilan o'zaro ta'sirlashishini yetarli darajada o'rganish imkonini beradi. Kichik molekulalar uchun noempirik hisoblashlar aniq natijalar berib, ayrim hollarda tajriba natijalaridan ham ustunlikka ega bo'ladi. Hisoblash qurilmalari – kompyuterlarning rivojlanishi sababli yetarlicha murakkab sistemalar, misol uchun kislotali birikmalarning ham xossalarini hisoblash imkonini yaratdi. Bu birikmalarda olingan spektroskopik tajriba natijalarini tasdiqlash va suyuq holatlarda agregatlarning hosil bo'lish mexanizmlarini izohlashda katta qulayliklar tug'dirmoqda [16]. Noempirik hisoblashlar natijasini spektroskopik usullar yordamidagi tadqiqotlar natijalari bilan solishtirish orqali o'rganilayotgan sistemaning tabiati va o'ziga xos tomonlarini yetarli darajada tushuntirish mumkin bo'ladi. Kvant kimyoviy hisoblashlar jarayonida o'rganilayotgan jarayon modellashtiriladi va real tajribalarda olingan natijalarga asosan hisoblashlar amalga oshiriladi.

Aytilgan modelning o'lchangan tajriba natijalariga mosligiga erishish uchun aniqlangan yaqinlashish doirasida molekulyar sistema uchun Shredinger tenglamasini yechish orqali amalga oshiriladi. Shredingerning elektron tenglamasi



yechimini fizik-matematik qonunlarga asoslangan Xartri-Fok yoki boshqa elektron korrelyasiyani hisobga oluvchi usullar yordamida olish mumkin. Buning uchun esa fundamental fizik doimiylar va atom yadrolarining soni va tarkibini bilish talab qilinadi. Birinchi navbatda, Born-Oppengeymer yaqinlashishini qo'llab, yadrolar koordinatalari ko'rinishida molekula tuzilishi beriladi. Shundan keyin, molekulyar orbitallar yaqinlashishi tanlanadi va atom orbitallari tasvirlovchi analitik funksiya tanlanadi. Bu funksiyaga «bazis funksiya» yoki oddiy qilib «bazis» deyiladi. Shu bilan tashqi ma'lumotlar chegaralanadi va zarur integrallarni hisoblash orqali o'za'ro moslashgan hisoblashlar amalga oshiriladi. Zarur hollarda molekulaning simmetriyasi inobatga olinadi. Molekulyar orbitallarning bunday hisoblash usuli noempirik yoki ab initio deb ataladi [17]. Hisoblashlarning murakkablik darajasi turlicha bo'lishi mumkin: hisoblashlarda to'liqlik darajasini oshirish uchun uyg'ongan elektron konfiguratsiyalarini qo'llash mumkin, yoki bo'lmasa Xartri-Fok usuli bilan cheklanish ham mumkin. Noempirik hisoblashlarda qo'llaniladigan bazis funksiyalar soni ham turli xil bo'lishi mumkin. Barchasi hisoblashlarning maqsadi va qo'llanilayotgan kompyuter darajasi orqali aniqlanadi [17-18]. Noempirik hisoblashlar bugungi kunda turli xil bazis qatorlariga ega bo'lgan Xartri-Fok sxemasiga asoslanadi. Molekulyar sistemaning xossalari aniqlash bazis qatori va korrelyasion effektlarga monoton bog'liq bo'ladi [18]. Misol uchun, noempirik hisoblashlar o'tkazish mumkin bo'lgan Gaussian dasturida turli xil atom orbitallari-bazislar to'plamini tanlash imkoniyati mavjud. Noempirik hisoblashlar o'tkazish uchun mo'ljallangan barcha zamonaviy dasturlarda gaus tipidagi orbitallarga ega bazislar to'plami qo'llaniladi. Har bir atom orbitali elektron zichligi taqsimlangan bir nechta gauss funksiyalari deb tasavvur qilish mumkin. Shunday qilib, noempirik hisoblashlarning asosiy maqsadi molekula tuzilishi va energiyasini bashorat qilishdan iboratdir.



II BOB. TAJRIBA QURILMASI TAVSIFI

2.1 § Tadqiqot obyektini tanlash va moddalarni eksperimentga tayyorlash

Molekulalararo vodorod bog'lanishning shu vodorod bog'lanishda ishtirok etmaydigan atomlarining tebranishlarida namoyon bo'lishi kam o'rganilgan. Bu polosalarning sturukturasini o'rganish katta ahamiyatga ega. Chunki polosalar formasi bo'yicha molekulalarning orentasion va tebranma relaksasiya vaqtlari aniqlanadi. Agar polosalar struktutasi vodood bog'lanishi hosil bo'lishi tufayli murakkab bo'lsa, bu polasa formasi bo'yicha relaksasiya vaqtlarini aniqlash ma'noga ega bo'lmaydi.

Protonodonor xususiyatiga ega bo'lgan quyi molekulyar spirt molekulalarlarining kombinasion sochilish spektrlarining ba'zi polosalarida sochilgan yorug'likning turli qutblangan polosalari maksimumlari chastotalari bir-biriga mos tushmaydi. Bu hodisaning sababi ham hali uncha aniq emas. Yuqorida sanab o'tilgan muammolar sababli spirtlar va ularning eritmalarining kombinasion sochilish spektrlarini batafsil o'rganish zarur va bunday tadqiqotlar yuqoridagi muammolarni yechishga yordam beradi. Shu sababli izobutil spirti molekulasini tanlab oldik. Izobutil spirti molekulasini o'rganish suyultirilgan gazlar va suyuqliklarni ishlab chiqarish, neft-gaz sanoatida keng qo'llanilganligi sababli ularni o'rganish ahamiyatlidir. Izobutil spirti suvda yaxshi eriydi. Izobutil spirti molekulasining xossalari:

Tashqi ko'rinishi rangsiz suyuq 20°C dagi zichligi 0.801 g/sm^3

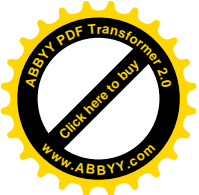
Kimyoviy formulasi - $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$;

Molyar massasi - 74.12 g/mol ;

Zichligi $0,801\text{ g/sm}^3$,

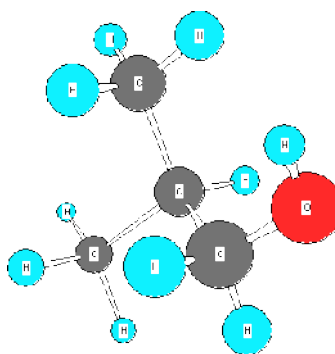
Erish temperaturasi – 108°C ;

Qaynash temperaturasi - 108.4°C ;



Qo'llanilishi sohasi: bo'yoq chiqarish sanoatida, nitroemalla plastifikatorlar, butilotsat, fenalloformadegis mumi hamda yog'lashda ishlatiladigan moylar aralashmalarda va yuvishda ishlatiluvchi moddalarda. Yog'lar uchun ekstragent vasifasini bajaradi. Izobutil unga kimyoviy yaqin bo'lgan butil spirit kabi, propilindan oksasintez qilib olinadi.

Quyidagi 2-rasmda izobutil spirti molekulasiining struktura formulasi keltirilgan.



2-rasm. Izobutil spirti molekulasiining struktura formulasi

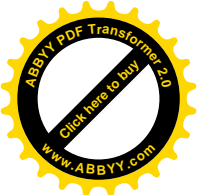
Moddani eksperimentga tayyorlash

Ma'lumki kombinatsion sochilish spektrining sifati va yaxshiroq foydali signal olish moddaniing oldindan ishlov berish o'lchashga yaroqli bo'lgan spektrlarini olish uchun bajarilishi zarur bo'lgan quyidagi asosiy talablar bilan aniqlanadi:

a) Nomolekulyar sochilishni kamaytirish uchun modda aralashmay qolgan zarrachalardan ozod bo'lishi kerak.

Modda iloji boricha toza bo'lishi kerak. Fluoresensiya tozalanmagan suyuqliklarda kam miqdordagi aralashmalarning borligi tufayli kelib chiqadi. Fluoresensiya natijasida kuchli fon hosil bo'ladi va spektrni kuzatishda, ayniqsa tekshirilayotgan moddaniing kichik konsentratsiyalarini o'lchashga halaqit beradi.

b) Modda iloji boricha rangsiz bo'lishi kerak. Hamma tekshirilayotgan moddalar markalaridan olingan, shundan keyin ularga qo'shimcha ishlov beriladi. Suyuqlik oldindan fosfor V oksidi (F_2O_5) yordamida quritiladi. Chunki suv miqdori kuchayishga va kombinatsion sochilishning susayishiga olib keladi. Binar



aralashmalarini tayyorlashda konsentratsiya eritilgan modda molekulari sonining erituvchi molekulari soniga nisbati ko‘rinishida hisoblanadi (nisbiy molyar tarkib). Binar aralashmalarni taqqoslashni osonlashtirish uchun nisbiy molyar tarkibni eritilgan modda va erituvchi konsentratsiyasining nisbati orqali ifodalash mumkin. 1:1 konsentratsiyada eritilgan modda molekulari soni erituvchi moddalarning molekulari soniga teng bo‘ladi va bu xolda nisbiy molyar tarkibni modda hajmlarining nisbati orqali quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\frac{M_{\alpha} \cdot d_{\beta}}{M_{\beta} \cdot d_{\alpha}} = \frac{V_{\alpha}}{V_{\beta}}$$

M_{α} va M_{β} - eritilgan modda erituvchining molekulyar og‘irligi.

d_{α} va d_{β} - ularning zichliklari.

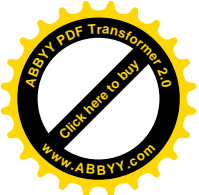
V_{α} va V_{β} - ularning hajmlari (sm^3 da)

Formuladan ko‘rinadiki, istalgan konsentratsiyani eritilgan modda va erituvchi hajmlarning nisbati orqali ifodalash mumkin. Idishni to‘ldirish va kerakli konsentratsiyani tayyorlash uchun shpritsdan foydalaniladi. Bunday oddiy qurilma kerakli konsentratsiyadagi eritmani tez va aniq tayyorlashga imkon beradi.

2.2 §. DFS-52 spektrometrining tuzilishi va ishlash prinsipi

DFS-52 spektrometri lazer manbai yordamida yoritilgan suyuq, kristal va polikristal moddalarda kombinatsion sochilish konturini olish va qayd qilish uchun muljallangan. Shuningdek bu spektrometr molekulyar - spektraskopiya oblastida fizika ximiyaviy tekshirishlar, ya'ni suyuqliklar suv aralashmalari, kristallar, plyonkalar tarkibi tuzulishini o'rganishga muljallangan [20-21].

Ishlash prinsipi. Tekshirilgan namunani monoxromatik yorug'lik bilan nurlantirganda sochilgan yorug'likning spektrida kombinatsion sochilish chiziqlari kuzatiladi. Bu chiziqlarning chastotasi namunaga tekshirilayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasining kombinatsiyasidan iborat bo'ladi. Kombinatsion sochilish chizigining intensivligi kichik bo'lib, ularni qayd qilish



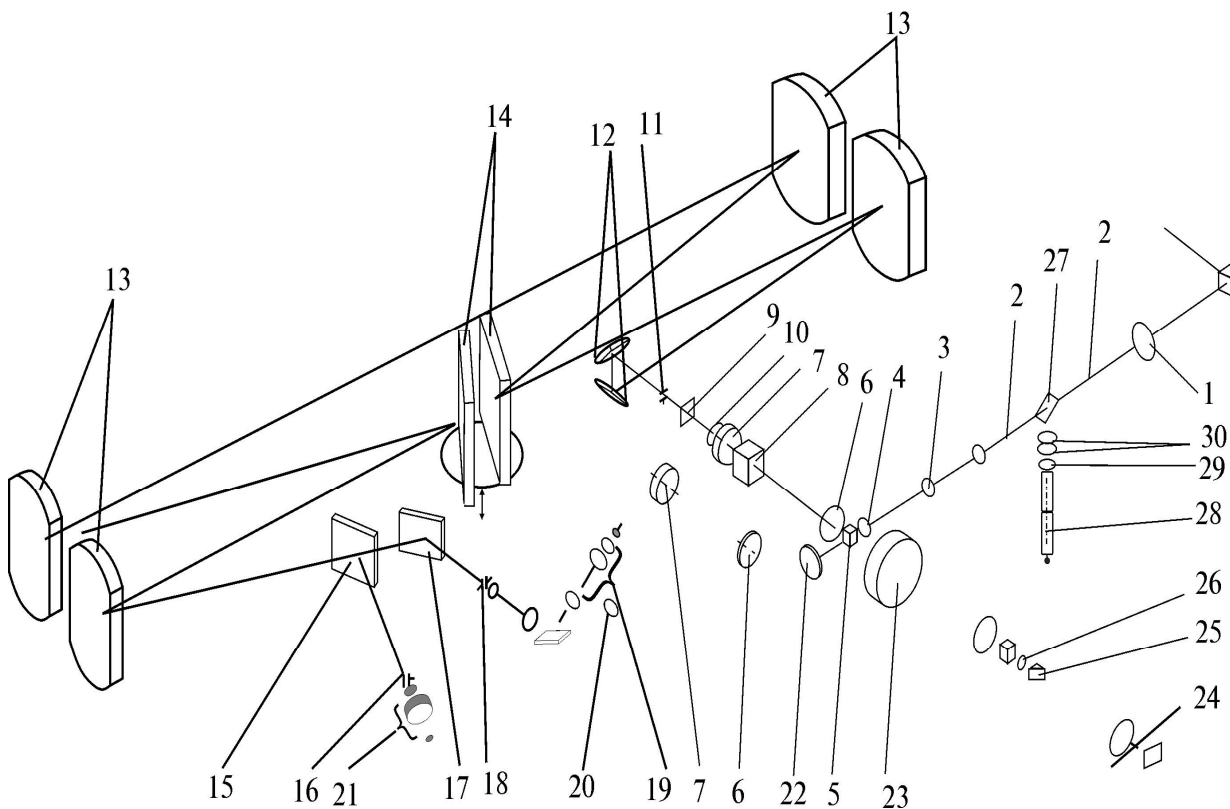
uchun yorug'likni kam sochuvchi monoxromatlardan foydalaniladi. Shuningga shovqin kam yetarlicha stabil bo'lgan, qayd qilishning sezgir chastotalaridan foydalanish zarur [22]. DFS-52 spektrometrining uyg'otuvchi manba sifatida seriyali lazerlar ishlatiladi. Yorug'likni tekshirish uchun yorug'likni kam sochuvchi difraksion panjarali qushaloq monoxromatorlardan foydalaniladi. Spekrni qayd qilish sovitilib turiladigan fotoelektron kupaytirgichlar yordamida amalga oshiriladi. Hisoblash qurilmasi spektrlarning ketma-ketligi va spektral diapozonning berilgan qismiga signallarning ketma-ket qayd qilinishi, olingan natijalarning matematik qayta ishlashni va natijalarni qayd qiluvchi asbobga chiqarishni ta'minlaydi.

DFS-52 spektrometrining tarkibi. Spektrometrning tarkibiga almashtiriladigan difraksion panjarali qushaloq monoxromator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi, chastotalar va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluvchi qurilma ERU-53, termoelektron sovuqgichning blok pitaniyasi, alfavit raqamli displey va yozuvchi qurilma, programmani tayyorlash sistemasi **IPG-003** ga kiruvchilar, laboratoriya o'zi yozuvchi asbobi **LKS-003**, ulash kabellari va o'tkazgichlar komplekti, almashtirish va ehtiyot qismlari kiradi [22].

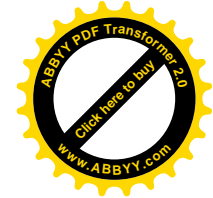
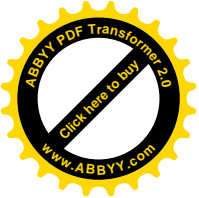
Optik sxemasi. Spektrometrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qushaloq monoxromator va qabul qiluvchi qurilma elementlaridan iborat. Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishini ta'minlaydi. Namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qushaloq monoxromatorning kirish tirqishiga yo'naltiradi. Qushaloq ko'zguli monoxromator almashtiruvchi difraksion panjaraga ega bo'lib u uyg'otuvchidan 20 sm masofada 8-25 sm/mm gacha teskari chiziqli dispersiyani ta'minlaydi. Qabul qilish blogining qayd qilish maydonida monoxromator qorachig'ining tasvirini beradi. Qabul qilish bloki taqqoslash kanalining oldiga o'rnatilgan yorug'lik o'tkazgich unga lazer nurlanishining bir qismini o'yg'otadi. DFS-52 spektrometrning optik sxemasi 3-rasmda keltirilgan.

Yorug'lik manбайдan lazerning parallel nurlar dastasi (1) tor yo'lli interferension yorug'lik filtridan, (2) krisovaya difrakmasidan, (3) qutublovchi

plastinkadan, (4) almashtiruvchi obyektlaridan biri orqali namuna (5) tekislikka fokuslanadi. Namunadan sochilgan nurlanish sferik linza (6) lardan biri orqali proyeksiyalovchi sistemada to'planadi va parallel dasta bo'lib obyektiv (7) dan iborat proyeksiyalovchi sistema namunaning tasvirini qushaloq monoxromatorning kirish tirqishi oldidan 2,3 yoki 3,5 marta kattalashtirib beradi. Linza oldi bilan obyektiv (7) orasida parallel nurlar dastasiga prizma analizator (8) quyish mumkin. Polyarizatsion tekshirishlar o'tkazilganda monoxromatorning kirish tirqishi oldiga dipolyarizatsiyalovchi klyonka (9) qo'yiladi. Yorug'lik filtrlar (10) spektrning 800 Nm dan yuqori oblastida ishlaydi. Kirish tirqishi (11) ning orqasiga ikkita yassi buruvchi ko'zgudan iborat yorug'lik dastasini buradi. Monoxromatorning obyektivi (13) sifatida parabolasiimon-ko'zgular ishlatiladi. Difraksion panjaralar (14) ni almashtirish mumkin (to'lqin uzunligi 400-600 nm diapozonida 1mm da 1800 mm chiziq bo'lgan panjaralar ishlatiladi). Chiqish buruvchi ko'zgu (15) difraksiyalangan yorug'lik chiqish tirqishiga (16) yo'naltiriladi. (15) ko'zgular yorug'lik dastasidan olgan buruvchi ko'zgu (17) yorug'likning chiqish tirqishining imitatoriga (18) yo'naltiriladi.



3-rasm. DFS-52 spektrometrining optik sxemasi



2.3 §. Kvanto-kimyoviy hisoblashlarni baholash va uning xatoligi

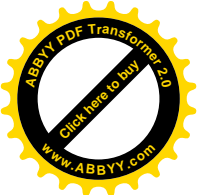
Noempirik hisoblashlar taklif qilingan modelning o'lchangan natijalar bilan adekvatligini ta'minlash uchun molekulyar sistemalarda ma'lum bir yaqinlashishlar orqali Shredinger tenglamasining yechimini topish jarayoni deb qarash mumkin. Tajriba orqali olish mumkin bo'lmagan, murakkab molekulyar tuzilmalarning va effektlarning xossalarini hisoblash uchun ko'pincha noempirik hisoblashlar – «abi- nito» (lotinchadan «Boshlang'ich») qo'llaniladi [17].

Bugungi kunda amaliyotda noempirik hisoblashlar uchun zamonaviy Gaussian dasturlarini qo'llab yuqori darajadagi aniqlikga erishish mumkin. Gaussian (*gaussian*) – molekulyar modellashtirishning turli-tuman usullarini o'zida mujassamlashtirgan molekulyar sistemalarning tuzilishi va xossalarini hisoblashga qaratilgan kompyuter dasturi [17]. Bu dastur nobel mukofoti laureati Djon Poplo va uning tadqiqot guruhi tomonidan yaratilgan bo'lib, bugungi kunda ham yangilanib kelinmoqda. Dasturning Gaussian-2003 (G03) versiyasi Gaussian-98 (G98) versiyasidan farq qiladi. Dasturning foydalanishdan eng so'ngisi Gaussian-09 hisoblanadi.

Kvant mexanikasining fundamental qonunlariga (bu qonunlar to'g'risida yuqoridagi bo'limlarda ma'lumotlarni qisman keltirib o'tdik) asoslangan holda Gaussian molekulyar sistemaning gaz va kompleks holatlarida ham asosiy, ham uyg'ongan holatlarida energiyasi, molekulyar tuzilishi va tebranish chastotlari, hamda bir qator molekula xossalari to'g'risida ma'lumot beradi.

Bu dastur molekulani o'rganishda bir qancha sharoitlarni, qisqa vaqt yashovchi birikmalar va o'tuvchi tuzilmalarni, tajribalarda kuzatish mumkin bo'lmagan holatlarni hisobga olishi bilan bugungi kunda noempirik hisoblashlarda eng ko'p qo'llanilayotgan dastur hisoblanadi. Bundan tashqari, dastur foydalanuvchi uchun ham qoulay interfeysga va yuqori samaradorlikga egaligi bilan farq qiladi. Quyidagi rasmda Gaussian-03 dasturining umumiy oynasi ko'rinishi keltirilgan:

G98 i G03 dasturiy majmuaning asosiy imkoniyatlari quyidagilardan iborat:



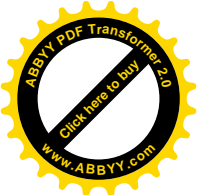
- tadqiq qilinayotgan sistemaning molekulyar mexinika usullari, yarimempirik va yuqori molekulyar sistemalarning tuzilishlarini, chegaralangan va chegralanmaga Xartri–Fok usuli yordamida tuzilishini optimizasiya qilish va energiyasini hisoblash;
- korrelyasionnoy energiyani hisobga olish imkoniyatiga ega bo'lib, analitik gradiyentlar yordamida g'alayonlanish nazariyasi, bog'langan klasterlar, konfigurasion o'zaro ta'sir va boshqalar uchun enegiyani hisoblash;
- yuqori molekulyar sistemalarni modellashtirish;
- kuch doimiylarini RHF, UHF, DFT, RMP2, UMP2 va CASSCF usullar yordamida analitik hisoblash;
- molekulaning spektral xosslarini hisoblash;
- tadqiq qilinayotgan sistema uchun eritmaning ta'sirini hisobga olish imkoniyati va h.k.

Gaussian dasturiy majmuasining kamchiligi sifatida hisoblash vaqtining kattaligi va hisoblash apparatlariga bo'lgan talabning yuqoriligini keltirish mumkin [23]. Hisoblashlar natijalari tadqiq qilinayotgan molekulalar (fazodagi yadrolar joylashishi) tuzilishi, elektron zichligi, molekula va uning tashkil etuvchilarining umumiy energiyasi va hokozolar to'g'risida juda keng sonli ma'lumotlar to'plangan fayl ko'rnishida bo'ladi. Shuning uchun Gaussian dasturiy majmuasining hisoblash natijalarini tahlil qilish o'rganish uchun maxsus dasturlar qo'llaniladi.

Ushbu malakaviy bitiruv ishida olidimizga qo'yilgan maqsad, tajriba natijalarini kvanto-ximik hisoblashlar bilan taqqoslash edi. Bu hisoblashlar tajriba olingan natijalarni to'g'riligini taqqoslash bilan birga, ularni tahlil qilishni osonlashtiradi. Turlicha hisoblash usullariga asoslangan kvanto-ximik hisoblashlar uchun ishlatiladigan dasturlar bugungi kunda ko'plab yaratilmoqda.

Bizning ishimizda qullanilgan hisoblashlar Gaussian 98W dasturi yordamida B3LYP usulida amalga oshirildi [23].

Endi qisqacha, noempirik hisoblashlarning xatoliklariga to'xtalib o'tsak, hisoblash natijalarini tajriba natijalari bilan taqqoslash jarayonida xatoliklar va

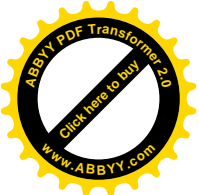


yuqorida aytib o'tganimizdek turli xil ko'paytuvchilarni bilish muhim ahamiyatga ega.

Barcha noempirik hisoblashlarda xatoliklar qisqa bazis to'plamlarini qo'llaganda oshib ketishi mumkin. Noempirik hisoblashlarda Xartri-Fok usulida organik molekulalar uchun DZP yoki 6-31G*: dan kichik bo'lmagan bazislar to'plamida natijalarda quyidagi xatoliklar uchraydi [23]:

- bog'lanish uzunliklari 0,01 – 0,02 Å aniqlikda hisoblanadi;
- elektron zichlik - 10%;
- bog'lanish uzunliklari va valent burchaklar - ~ 1 %;
- konfarmasion o'tishlar (aylanish) energiyasi - < 2 kkal/mol;
- tebranish chastotlari 10-12 % ga yuqori hisoblanadi. $0,89 \pm 0,01$

ko'paytuvchi orqali tajriba bilan mos keltirish mumkin.

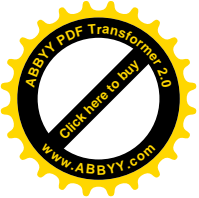


III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

3.1 §. Kombinatsion sochilish spektrlarida izobutil spirti molekulasining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarini o'rganish

Agar vodorod bog'lanish A-H va B guruhlarida bir turli va har turli ikki yoki undan ko'proq molekulalar orasida yuz bersa, buni molekulalararo vodorod bog'lanish deyiladi. Vodorod bog'lanish bir birikma molekulalar orasida ham yuz beradi. Bunday bog'lanishni ichki molekulyar vodorod bog'lanish deyiladi [12]. Molekulalararo vodorod bog'lanishlar turli tarkibdagi qo'shilmalarning hosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Vodorod bog'lanishning eng ko'p turi ayni bir birikmaning ikki molekulasi orasida bog'lanishlardan iborat [12-14]. Hosil bo'lgan komplekslar dimerlar deyiladi. Bundan tashqari bir vaqtning o'zida bir necha bir xil yoki har xil molekulalar vodorod bog'lanish orqali o'zaro bog'lanishi mumkin. Vodorod bog'lanish ko'pgina fizik, ximik, biologik jarayonlarda muhim rol o'ynaydi. Hamda moddaning ko'pgina xossalarini belgilaydi. Bu bog'lanish vodorod atomi bo'lgan deyarli hamma moddaning har qanday agregat holatida uchraydi.

Bizga ma'lumki spirtlar va uning eritmaları murakkab sistemalar qatorida turadi, bu esa o'z navbatida toza suyuqliklarda molekulalararo vodorod bog'lanish mavjudligi va bunday bog'lanishlari suyuqlik aralashmasining molekulalari orasida ham hosil bo'lishi bilan bog'liqdir. Ayni vaqtda suyuqliklarning o'zi murakkab bo'lib, uning anomal xossalarini, molekulalararo vodorod bog'lanishi va tuzilishi haqida hozirgi vaqtgacha ilmiy adabiyotlarda bahs yuritilmoqda [34-37]. Hozirgi vaqtgacha spirtlar va ularning turli eritmalarining xossalari anomaliyasi molekulyar manzarasi to'lig'icha yechimini topgan emas. Spirtlar va ularning aralashmalarida, suvli eritmalarining oziq-ovqat va boshqa sanoat tarmoqlarida, organizmlarning hayot faoliyatida muhim o'rin egallaydi, shuning uchun ham spirtlar va ularning boshqa eritmalarini o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir.



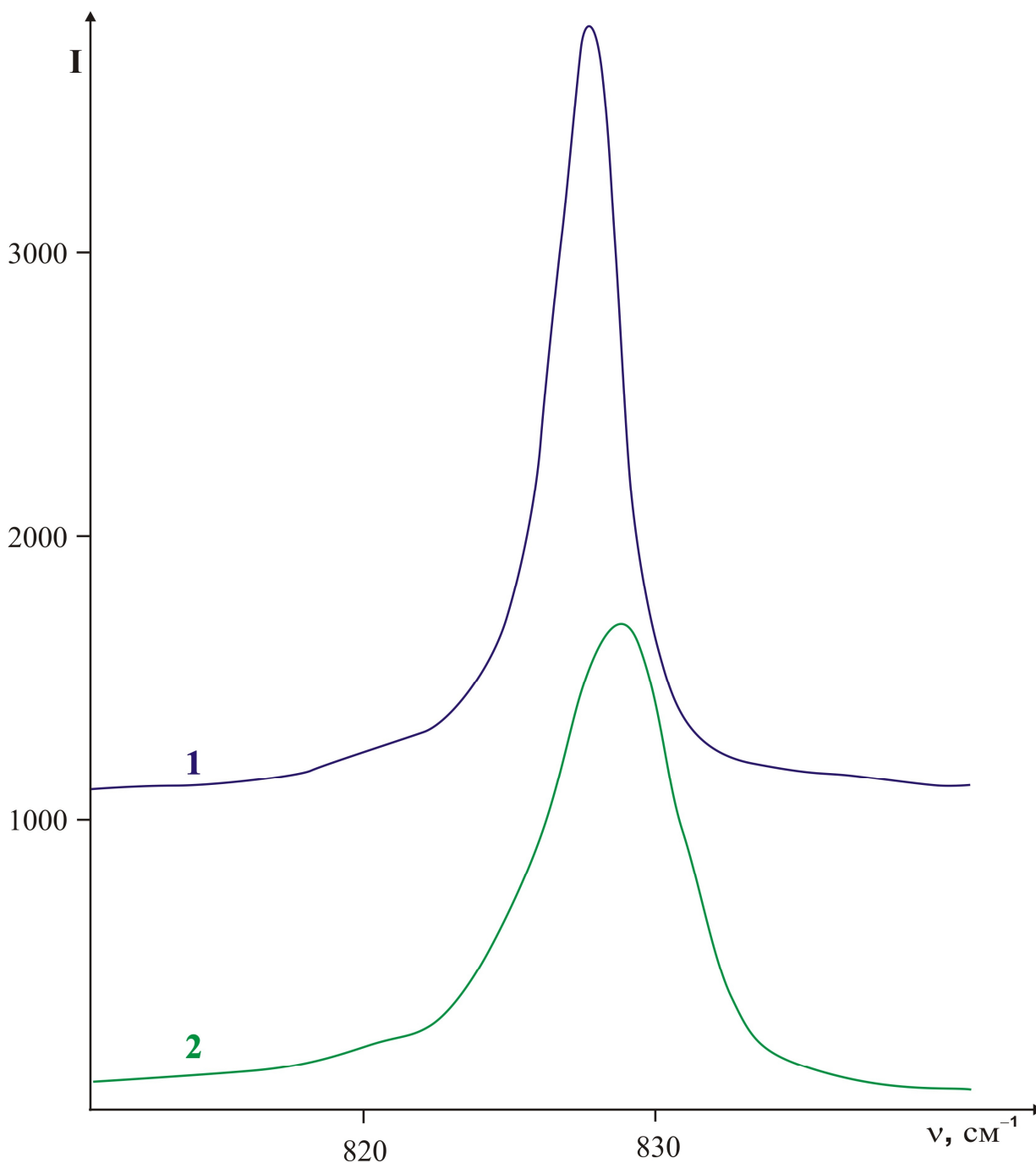
Yuqoridagi keltirilgan fikrlarga asoslangan holda ushbu bitiruv malakaviy ishida molekula xossalari va ular orasidagi o'z'aro ta'sirlarni o'rganish uchun izobutil spirti molekulasi tanlab oldik va izobutil spirti molekulasining xususiyatlarini kombinatsion sochilish spektrlari hamda kvanto-kimyoviy hisoblashlarda o'rgandik.

Tadqiqot ishimizdan maqsad, izobutil spirti molekulalarining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarini va molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini kvanto-kimyoviy hisoblashlar orqali o'rganishdan iborat. Shuningdek, kvanto-kimyoviy hisoblashlarda izobutil spirti molekulasi o'zaro orientatsiyasi, bog' uzunliklari, zaryadlar taqsimlanishi, depolyarizatsiya koeffitsiyentlari, tebranish chastotalari va dimer hosil bo'lish energiyalarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqot natijalari avtomatlashtirilgan DFS-52 spektrometrida qayd etildi. Uyg'otuvchi yorug'lik manbai sifatida to'liq uzunligi 632,8 nm ga teng bo'lgan geliy-neon lazeridan foydalanildi. Olingan tadqiqot natijalarini to'laroq tushuntirish maqsadida Gaussian-98W dasturida B3LYP yaqinlashishda 6-31G (d,p) funksiyalar to'plami negizida kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazildi.

Olingan tajriba natijalarini tahlil qilib chiqamiz. 5-rasmda izobutil spirti molekulasi kombinatsion sochilish spektrlaridagi 826 cm^{-1} spektral chizig'ining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari keltirilgan. 1-holda izobutil spirti molekulasi kombinatsion sochilish spektrlaridagi 826 cm^{-1} spektral chizig'ining parallel tashkil etuvchisi keltirilgan bo'lib, uning yarim kengligi $1,4 \text{ cm}^{-1}$ ga teng ekan. 2-holda esa izobutil spirti molekulasi kombinatsion sochilish spektrlaridagi $827,2 \text{ cm}^{-1}$ spektral chizig'ining perpendikulyar tashkil etuvchisi keltirilgan bo'lib spektral chizig'imiz past chastota tomondan assimetriyaga ega bu esa polosaning murakkabligidan dalolat beradi. Bu spektral chizig'imizning yarim kengligi esa $2,7 \text{ cm}^{-1}$ ni tashkil etadi. Tajriba natijalari ko'rsatdiki, izobutil spirti molekulasi kombinatsion sochilish spektrlarining parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari orasidagi farq $1,2 \text{ cm}^{-1}$ ni tashkil etar ekan. Bunday parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari

maksimumlarining mos tusmasligi va perpendikulyar tashkil etuvchisining pa
chastota tomondan assimetriyaga ega bo'lishi spektral chzig'imizning
murakkabligidan dalolat beradi.

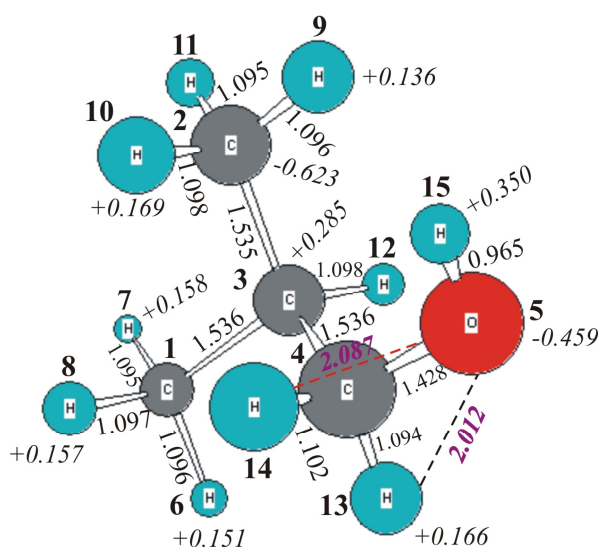


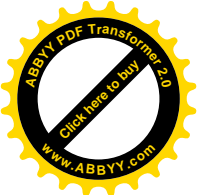
5-rasm. *Izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari*

Xulosa qilib aytadigan bo'lsak, izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi bunday o'zgarishlar ya'ni parallel va perpendikulyar

tashkil etuvchilari maksimumlarining bir-biriga nisbatan siljishi hamda perpendikulyar tashkil etuvchilarining past chastota tomondan assimetriyaga ega bo'lishi izobutil spirti molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi tufayli suyuqlil tarkibida turli xil agregatlar mavjud bo'lishida deb tushuntirdik.

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'yektlar uchun, vodorod bog'lanish va Van-dyer-Vaals molekulararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molekulyar agregatlarni o'rganishda yangi kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning "spektri, tuzilishi va xossalari" orasidagi bog'lanishlarni o'rnatish hamda molekulararo o'zaro ta'sirlarni, molekular agregatlanishini va ularni o'rab turgan muhitning molekulaning spektral parametrlariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega. Shu sababli, olingan tajriba natijalarini to'laroq tushuntirish maqsadida kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazdik. 6-rasmda izobutil spirti molekulasining monomeri uchun hisoblash natijalari keltirilgan. Hisoblashlar ko'rsatdiki, barcha vodorod atomlari musbat, uglerod va kislorod atomlari esa manfiy zaryadlangan. O^5H^{13} atomlar orasidagi masofa $2,012 \text{ \AA}$ va O^5H^{14} atomlar orasidagi masofa esa $2,087 \text{ \AA}$ gat eng ekan. Bu bog' uzunligi vodorod bog' uzunligiga teng bo'lganligi uchun molekula ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud degan xulosani beradi. Atomlar orasidagi masofalar va ularning zaryadlari 1-jadvalda keltirilgan.





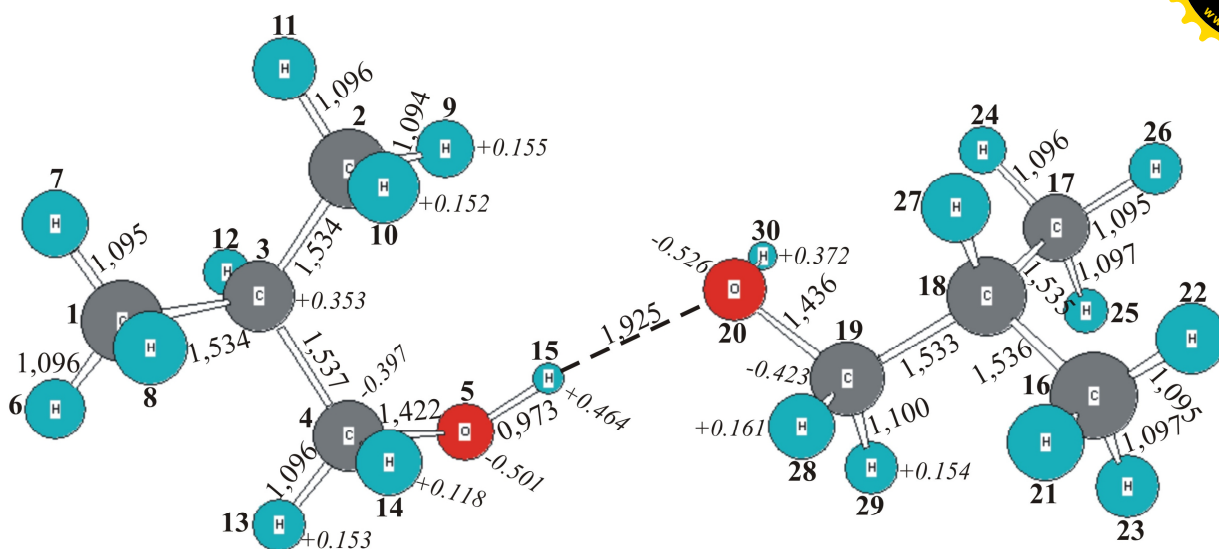
6-rasm. Izobutil spirti molekulasining kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari
(monomer)

1-jadval

Izobutil spirti molekulasini monomeri uchun kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari

Atomlar nomi	Atomlar orasidagi masaofa	Atom nomi	Zaryad
C1-C3	1.536	C1	-0.624
C3-C2	1.535	C2	-0.623
C3-C4	1.536	C3	-0.285
C4-O5	1.428	C4	-0.325
C2-H9	1.096	O5	-0.459
C2-H10	1.098	H6	0.151
C2-H11	1.095	H7	0.158
C3-H12	1.098	H8	0.157
O5-H15	3.041	H9	0.136
C4-H13	3.824	H10	0.169
C4-H14	3.187	H11	0.156
C1-H7	1.769	H12	0.164
C1-H8	1.771	H13	0.165
C1-H6	1.096	H14	0.137
		H15	0.350

7-rasmda izobutil spirti molekulasining dimeri uchun hisoblash natijalari keltirilgan bo'lib, rasmdan ko'rinadiki, izobutil spirti molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida ochiq strukturali dimer hosil qilar ekan. Molekulararo vodorod bog'lanish birinchi izobutil spirti molekulasining H¹⁵ vodorod atomi bilan ikkinchi izobutil spirti molekulasining O²⁰ kislorod atomlari orasida vujudga kelib, bu bog' uzunligi 1,925 Å ni ga teng ekan. Dimer hosil bo'lish energiyasi esa 8,5 kkal/molni tashkil etadi. Dimer holida ham molekula ichidagi ichki molekulyar vodorod bog'lanish saqlanar ekan. Izobutil spirti dimeri uchun hisoblash Atomlar orasidagi masofalar va ularning zaryadlari 2-jadvalda keltirilgan.

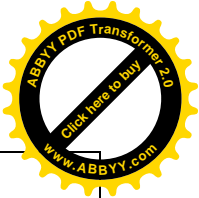
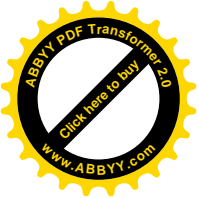


7-rasm. Izobutil spirti molekulasining dimeri uchun kvanto-kimyoviy hisoblash natijalari

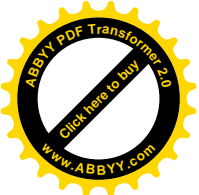
2-jadval

Izobutil spirti molekulasi dimeri uchun nazariy hisoblash natijalari

Atomlar nomi	Atomlar orasidagi masofa	Atom nomi	Zaryad
C1-C3	1.5364	1C	-0.659
C3-C2	1.5348	2C	-0.597
C3-C4	1.537630	3C	0.353
C4-O5	1.422	4C	-0.397
C1-H8	1.0978	5O	-0.500
C1-H6	1.0962	6H	0.146
C1-H7	1.0956	7H	0.154
C3-H12	1.0993	8H	0.155
C2-H11	1.0960	9H	0.155
C2-H9	1.0943	10H	0.151
C2-H10	1.0982	11H	0,149
C4-H13	1.0962	12H	0,159
C4-H14	1.103	13H	0,152

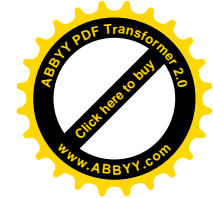
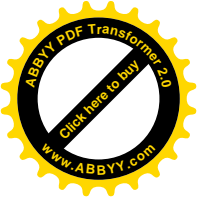


O5-H15	0.973	14H	0,118
C16-C18	1.536	15H	0,463
C18-C17	1.535	16C	-0,628
C18-C19	1.533	17C	-0,630
C19-O20	1.436	18C	0,410
C16-H21	1.0958	19C	-0,423
C16-H22	1.095	20O	-0,526
C16-H23	1.097	21H	0,146
C17-H25	1.097	22H	0,168
C17-H26	1.095	23H	0,155
C17-H24	1.096	24H	0,128
C18-H27	1.099	25H	0,175
C19-H28	1.093	26H	0,162
C19-H29	1.100	27H	0,166
O20-H30	0.966	28H	0,161
		29H	0,153
		30H	0,372



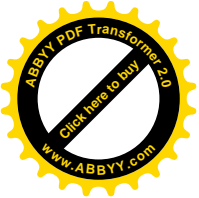
XULOSA

- Izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilari maksimumlari bir-biriga mos tushmas ekan, ular orasidagi farq $1,2 \text{ cm}^{-1}$ ni tashkil etar ekan.
- Izobutil spirti molekulasining kombinatsion sochilish spektrlaridagi parallel va perpendikulyar tashkil etuvchilarining mos tushmasligi va perpendikulyar tashkil etuvchisining past chastota tomondan assimetriyaga ega bo'lishi izobutil spirti molekulalari o'zaro molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilishi tufayli suyuqlik tarkibida turli xil agregatlar mavjud bo'lishida ekan.
- O^5H^{13} atomlar orasidagi masofa $2,012 \text{ \AA}$ va O^5H^{14} atomlar orasidagi masofa esa $2,087 \text{ \AA}$ ga teng ekan. Bu bog' uzunligi vodorod bog' uzunligiga teng bo'lganligi uchun molekula ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud degan xulosani beradi.
- Izobutil spirti molekulalari o'zaro molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida ochiq strukturali dimer hosil qilar ekan. Dimer hosil bo'lish energiyasi $8,5 \text{ kkal/mol}$ ni tashkil etar ekan.

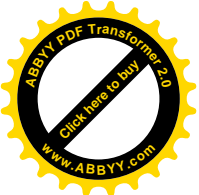


FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Вукс М.Ф., Атоходжаев А.К., Тухватуллин Ф.Х. Крыло линии релеевского рассеяния света в жидкости и релаксационные явления // Современные проблемы физической химии. Том 5. М.: Изд. МГУ, 1970. с. 210-223.
2. Вукс М.Ф. Рассеяние света в газах, жидкостях и растворах. Л.: Изд. ЛГУ, 1977. с. 318.
3. Собиров Л.М., Жураев Б.С. Молекуляр оптика, Самарканд, 2009.
4. Ландсберг Г.С. Оптика, Тошкент, «Ўқитувчи», 1981.
5. Брандмюллер И. Мозер Г. Введение в комбинационная спектроскопия. Мир - 1972 г.
6. Калтрауш К. Спектры комбинационного рассеяния. М.Изд-во ИЛ. 1952. С.217.
7. Орлова Н.Д. Молекулярная спектроскопия. 1981. И5
8. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнев Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: 1970. 515 с.
9. Ferraro J.R., Nakamota K. Introductory Raman spectroscopy.//Academic. Press. Inc. 1994, p.363
10. Фабелинский И.Л. Комбинационному рассеянию. УФН. 1998. №12 168. С.1341-1360.
11. Хабубиллаев П.К., Булавин Л.А., Погорелов В.Е., Тухватуллин Ф.Х., Лизенгиевич А.И., Отажонов Ш.О., Жумабаев А. “Динамика молекул в жидкостях”. Издательства Наук. Республики Узбекистан. 2009 г.
12. Соколов Н.Д. Водородная связь. Успехи физических наук. 1955, Т. LVII, вып 2. С. 205-278.
13. Соколов Н.Д. Водородная связь. М.: Наука, 1981, -287 С.
14. Пиментал Дж., Мак-Клелан О. Водородная связь. -М.:Мир. 1964, С.462
15. Драго Р. Физические методы в химии. – Москва: МИР. 1981. – 197с.



16. Давыдов А.С. Квантовая механика. Физматгиз, М. 748 с. (1963).
17. Кларк Т, “Компьютерная химия”. - Москва. Изд. “МИР” 1990. -269 с.
18. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. “Теория строения молекул”.- Москва. ВШ. 1979. -359 с.
19. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. Ленинград, Химия. 1991. С.432.
20. Бабушкин А.А., Бажулин П.А., Королев Ф.А., Левшин Л.В., Прокофьев В.К., Стриганов А.Р. Методы спектрального анализа. М., 1962, - 508 С.
21. Раутиан С.Т. Реальные спектральные приборы // Усп. физ. наук. 1958. Т. 66. Вып. 3. С. 475-517.
22. Технический описание спектрометра ДФС-52.
23. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 98. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
24. Suzuki S., Green P.G., Bumgarner R.E., Dasgupta S., Goddard W.A., Blake G.A. Science (1992), 257, 942.
25. Pribble R.N., Garret A.W., Haber K., Zwier T.S. J. Chem. Phys. (1995), 103, 531.
26. Djafari S., Lembach G., Barth H.D., Brutschy B.Z. Phys. Chem. (1996), 195, 253
27. Djafari S., Barth H.D., Buchhold K., Brutschy B. J. Chem. Phys. (1997), 107, 10573.
28. Warycha S., Rytting J.H. Vapor pressure studies of pyridine, picolines and 2,6-lutidine in isooctane // J. Solution Chem., 1984, V. 13, Is. 8, pp. 589-598.
29. Wawer I., Warycha S. ^1H and ^{13}C NMR study of the interaction of pyridine, picolines and 2,6- dimethylpyridine with 2,2,4-trimethylpentane // Polish J. Chem. 1985, 59, pp. 565-572.
30. Сагитова Э.В., Тухватуллин Ф.Х., Атаходжаев А.К. Изучения межмолекулярных взаимодействий в растворах пиколинов по спектрам



- комбинационного рассеяния // *Опт. и спектр.* 1970. Т.28. В. 3. С. 46-470.
31. Sabirov L.M., Semenov D.I., Khaidarov Kh.S. Temperature and concentration dependences of the frequency shift of the Rayleigh line fine-structure components in aqueous solutions of γ -picoline // *Opt. and spectros.*, 2007, 103, 3, pp. 490-495.
 32. Sabirov L.M., Semenov D.I., Khaidarov Kh.S. Mandelshtam-Brillouin scattering spectra of aqueous solutions of γ -picoline and manifestation of a phase transition of the structural type in these spectra at low concentrations of γ -picoline // *Opt. and spectros.*, 2008, 105, pp. 369-376.
 33. Tukhvatullin F.H., Hudayberdiev B.G., Jumabaev A., Hushvaktov H.A., Absanov A.A. Aggregation of molecules in liquid pyridine and its solutions. Raman spectra and quantum-chemical calculations // *J. Mol. Liq.* 2010, 155, pp. 67-70.
 34. Sett P., Ghosh M., Mallick P.K., Chowdhury J. The vibrational assignment of phenanthridine molecule based on normal coordinate analysis and DFT // *J. Raman Spectros.* 2008, V. 39, Is. 12, pp. 1878–1889.
 35. Balon M., Guardado P., Munoz M.A., Carmona C. A spectroscopic study of the hydrogen bonding and π - π stacking interactions of harmane with quinoline // *Biospectroscopy.* 1998, V. 4, Issue 3 pp. 185-195.
 36. Hobza P., Spirko V., Havlas Z., Buchhold K., Reimann B., Barth H.D., Brutschy B. Anti-hydrogen bond between chloroform and fluorobenzene // *Chem. Phys. Let.* 1999, V. 299, Is. 2, pp. 180-186.
 37. Reimann B., Buchhold K., Vaupel S., Brutschy B., Havlas Z., Spirko V., Hobza P. Improper, Blue-Shifting Hydrogen Bond Between Fluorobenzene And Fluoroform // *J. Phys. Chem. A.* 2001, 105(23), pp. 5560–5566.