

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

**ALISHER NAVOIY NOMIDAGI
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

FIZIKA FAKULTETI

FIZIKA YO'NALISHI

«OPTIKA VA SPEKTROSKOPIYA» KAFEDRASI

**KVANTO-XIMIK HISOBLASHLAR YORDAMIDA PROPILEN VA
UNING ERITMALARIDA MOLEKULALARARO TA'SIR KUCHLARINI
O'RGANISH**

MALAKAVIY BITIRUV ISHI

Ilmiy rahbar: dots.A.A.Absanov

Bajaruvchi: Davronov Izzatbek

Malakaviy bitiruv ishi "Optika va spektroskopiya" kafedrasida bajarildi. Kafedraning 2014 yil _____ majlisida muhokama qilindi va himoyaga tavsiya etildi (bayonnoma № ____).

Kafedra mudiri:

prof. A.Jumabaev

Malakaviy bitiruv ishi YaDAKning 2014 yil "____" _____dagi majlisida himoya qilindi va _____ ball bilan baholandi (bayonnoma № ____).

YaDAK raisi:

A'zolari:

SAMARQAND – 2014

MUNDARIJA

KIRISH.....

I BOB NAZARIY QISM.

1.1 Molekulalararo ta'sir kuchlari.....

1.2 Molekulalararo o'zaro ta'sir va uning spektrda namoyon bo'lishi...

1.3 Vodorod bog'lanish va uning tebranish spektrida namoyon bo'lishi.....

1.4 Vodorod bog'lanishli komplekslarning fizik parametrlarni kvantoximik hisoblashlar orqali o'rganish.....

II BOB AMALIY QISM

2.1 Tanlab olingan moddaning xususiyatlari.....

2.2 Tajriba qurilmasining tuzilishi va ishlash prinsipi

2.3 Kvanto-kimyoviy hisoblashlar va ularning xatoliklari.....

III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

3.1

XULOSA.....

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.....

KIRISH

Mavzuning dolzarbligi: Molekulalararo ta'sir kuchlarini nazariy usullar bilan o'rganish tajribada olingan natijalarni mukammal tushinihs imkonini hamda yangi ma'lumotlarga ega bo'lish imkoniyatlarini keltirib chiqarmoqda. Moddalarning hossalarni o'rganish amaliyotda, ishlab chiqarishda, sanoatda muhim o'rin egallaydi. Suyuq holatdagi moddalarning hossalarni o'rganishning juda ko'p spektoskopik usullari mavjud. Bundan tashqari ilm-fanning rivojlanishida lazerlarni elektron hisoblash mashinalari bilan birgalikda qo'llanilishi juda tez amalga oshadigan jarayonlarni tadqiq etish va ulardan amalda foydalanish imkoniyatlari mavjudligini ko'rsatib berdi. Murakkab moddalarning molekulyar spektrlari nurlanishi katta ahamiyatga egadir. Moddaning asosiy xususiyatlari va fizikaviy tabiatini o'rganishda molekulalararo o'zaro ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro tasirning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli optik usullardan foydalanish mumkin. Ular orasida eng samarali usullaridan, yoruglikning kombinatsion sochilish spektrlarini o'rganish usulidir. Optik jihatdan bir jinslilikning sharti muhitning turli qismlarining sindirish ko'rsatkichlarining bir xil qiymatga ega bo'lishini bildiradi. Bunday muhitning butun hajmda sindirish ko'rsatkichi doimiy bo'lganda yoruglikning sinish hodisalari yuz bermaydi degan xulosa kelib chiqadi. Kombinatsion sochilish spektrlari yordamida molekulalararo o'zaro ta'sirlar to'g'risida ma'lumot olish uchun turli-xil usullardan foydalanish buyicha ko'p yillardan buyon izlanishlar olib borilmoqda va bu sohada bir qancha ishlar qilingan. Bu soha bilan shug'ullanuvchi ko'pchilik tadqiqotchilar bu moddalarda kuzatiladigan turli effektlarning yuzaga kelishini har xil o'zaro ta'sirlar orqali tushuntirishgan. Molekulalararo o'zaro ta'sir tabiatini o'rganish zamonaviy molekulyar fizikaning asosiy tushunchalaridan biridir. Moddalarning asosiy xususiyatlarini va fizik tabiatini o'rganishda molekulalararo ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirlarning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli xil optik usullar qo'llaniladi. Moddalarning xossalari uning qanday molekulalardan tuzilganligiga va bu molekulalar o'zaro qanday joylashganligiga bog'liq. Fizika, kimyo va biologiyadagi ko'pgina fundamental masalalarni hal

qilishda moddadagi molekulalarning miqdorini, ularning tuzilishini va boshqa xossalarni keng temperatura, bosim va konsentrasiya intervalida hamda turli agregat holatlarda bilish talab etiladi.

Bog'lanishlar orasidagi qonuniyatlarni aniqlash, xarakterli va qat'iy agregatlarni ajratish suyuqliklarning molekulyar tuzilishi haqida xulosa bugungi kunda juda dolzarbdir. Adabiyotlarda spirtlar va ularning turli eritmaları to'g'risida ma'lumotlar juda ko'p bo'lishiga qaramasdan, hozirgi vaqtgacha o'rganish lozim bo'lgan ishlar mavjud deb o'ylaymiz hamda ushbu moddalarning hususiyatlarini o'rganishni maqsad qilib oldik. Ishdan asosiy maqsad suyuqlik va ularning turli xil eritmalarida molekulalararo ta'sir kuchlarini kvanto-ximik hisoblashlar yordamida o'rganishdan iborat..

Tadqiqot ob'yekti: ushbu malakaviy bitiruv ishida molekula xossalari va ular orasidagi o'zaro ta'sirlarni o'rganish uchun propilen spirti molekulasini tanlab oldik. Propilen va uning turli erituvchilari ustida olib borilgan tajriba natijalarining tahlili va noempirik kvanto-ximik hisoblashlarning natijalar bilan mosligi bo'yicha ishlar keltirildi.

Ishning maqsadi: Propilen molekulasida vodorod bog'lanish va boshqa turdagi molekulalararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molekulyar agregatlarni o'rganish va kvanto-ximik hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning tuzilishi va optik xossalarni aniqlash hamda ular to'g'risida yangi ma'lumotlar olish hamda molekulalararo o'zaro ta'sirlarni yanada chuqurroq o'rganishdan iborat.

Tadqiqot usuli: B3LYP (DFT) 6-31G⁺⁺(d,p) noempirik kvanto-ximik hisoblashlar.

Amaliy ahamiyati: o'rganilgan natijalarga asoslanib suyuqliklar to'g'risidagi bilimlarni boyitish va suyuqliklarning dinamik tuzilishi xarakteriskalarini aniqlashda komplekslar hosil qilish jarayonini o'rganishdir, qolaversa yuqori kurs talabalariga mutaxassislik kursidan ma'ruzalar o'tishda o'z tadbiriqini topadi.

Ishning ilmiy yangiligi: Kvanto-ximik hisoblashlar orqali turli holdagi agregatlarni hosil bo'lishida molukulalarning fazoviy tuzilishi orientatsiyalari

aniqlandi hamda ilk marta propilen spirit, suv hamda metil spirti molekulari uchun nazariy hisoblashlar orqali molekularning o'zaro joylashishi, bog' uzunliklari, zaryadlar taqsimoti, tebranish chastotalari va kompleks hosil bo'lish energiyalari aniqlandi.

BITIRUV ISHINING ASOSIY MAZMUNI

Bitiruv ishi tarkibi kirish, uchta bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat. Bitiruv ishi ___ ta varaq matn, ___ ta rasm va ___ ta nomdagi foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat.

Kirish qismida. Ishning ilmiy yangiligi, tadqiqot ob'ektlari to'g'risida atroflicha to'xtalilgan.

Birinchi bobda. Molekulararo o'zaro ta'sirlarning bugungi kundagi tasnifi, yorug'likning modda bilan doir ma'lumotlar, molekulararo o'zaro ta'sirlarning maxsus turi bo'lgan vodorod bog'lanish va nazariy hisoblashlarga doir ma'lumotlar batafsil keltirilgan.

Ikkinchi bobda. Tanlab olingan moddalarning tasnifi, asbobning ishlash prinsipi, moddalarni eksperimentga tayyorlash va hisoblash natijalari keltirilgan.

Uchinchi bobda. Tadqiqot natijalari ustida kvanto-ximik hisoblashlar o'tkazilib, tegishli xulosalar chiqarilgan.

I BOB. NAZARIY QISM

1.1. MOLEKULALARARO TA'SIR KUCHLARI

Atomlar orasidagi, istalgan ikkita molekula orasida ham molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari deb nomlanuvchi elektr kuchlari ta'sir qiladi. Molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari ko'pincha Van-der-Vaals kuchlari deb ham ataladi. Ular modda agregat xolatining o'zgarishini, adsorbtsiya xodisasini tushintiradi va fazalar bo'linish chegarasida yuz beruvchi jarayonlarda asosiy rol o'ynaydi [1].

Molekulalararo kuchlar elektrostatik tabiatga ega. Ular tortishish va itarishish kuchlaridan iborat. Itarishish har xil molekulalarning elektron qobiqlarining o'zaro ta'siri bilan aniqlanadi, tortishish esa ularning dipol momenti va qutblanuvchanligiga bog'liqdir. Molekulalararo kuchlar qisqa ta'sirlashuvchi kuchlar hisoblanadi va zarrachalar orasidagi masofaning oshishi bilan tortishishga nisbatan itarishish tez kamayadi. Bir xil tabiatga ega bo'lgan molekulalararo kuchlarining ta'siriga qarab uch guruhga ajratilgan:

1. Orientatsion
2. Induksion
3. Dispersion

Endi bu kuchlar ustida to'xtalib o'tamiz.

Orientatsion ta'sir: Molekulalar elektr xususiyatining asosiy xarakteristikalarining dipol momenti r va qutblanuvchanligi a dir. Bu kattaliklar molekulalar o'rtasidagi o'zaro ta'sir kuchini aniqlaydi. Bu kuchlar molekulalar o'rtasidagi masofa kamayganda ularni bog'laydi, gazlar suyuqlikka aylanadi va h.k. Molekulalarning bir - birini tortishiga sabab nima?

Bunga javob berish uchun avval qutbli molekulalarni qaraymiz. Bunday molekulalarda (+) va (-) zaryadlarning joylashishi har xil bo'lishiga qaramasdan, ular o'zaro elastik kuch bilan tortishishlari mumkin [2-4].

Turli ishoraga ega bo'lgan zaryadlarning o'zaro tortishish va bir xil ishoraga ega bo'lgan zaryadlarning itarishish energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$U = -\frac{e^2}{(r+2l)} - \frac{e^2}{r} + \frac{2e^2}{(r+l)} \quad (1)$$

(1) ni boshqacha ko'rinishda ham yozish mumkin:

$$U = -\frac{2e^2l^2}{(r+2l)(r+l)r} \quad (1')$$

Agar $l \ll r$ deb olsak, u holda (1') ni quyidagicha yozish mumkin:

$$U = -\frac{2e^2l^2}{r^3} \quad (2)$$

Ma'lumki, molekulaning dipol momenti $r=el$.

$$U = -\frac{2p^2}{r^3} \quad (2')$$

Bundan: Demak, oriyentasion ta'sir energiyasi:

$$U_{op} = -\frac{2p^2}{r^3} \quad (3)$$

Agar o'zaro ta'sir etuvchi molekulalarning dipol momentlari har xil bo'lsa, (3) formulani quyidagicha yozamiz:

$$U_{op} = -\frac{2p_1p_2}{r^3} \quad (4)$$

Issiqlik xarakati molekulaning oriyentasiyasiga ta'sir qiladi. Xuddi shuningdek, bu harakat oriyentasion ta'sir energiyasiga ham ta'sir ko'rsatadi. Shu tufayli oriyentasion ta'sir energiyasini bilish uchun issiqlik xarakatining ta'sirini hisobga olish kerak. Bu ta'sirni hisobga olish uchun a qutblanuvchanlikka ega bo'lgan sistemaning kuchlanganligi E bo'lgan maydondagi qutblanishini qaraymiz. Bunday maydon ta'sirida induksiyaalangan dipol momenti r' hosil bo'ladi. Dipolning ana shu maydondagi energiyasi quyidagicha bo'ladi:

$$U = p'E \cos(p'E) \quad (5)$$

Molekulaning dipol momenti maydon tomonidan induksiyaalanganligi uchun uning yo'nalishiga mos tushadi, natijada $\cos(r'E)=1$ bo'ladi. Bu hosil bo'lgan maydon kattaligining o'zgarish chegarasi 0 dan E gacha bo'ladi. Natijada oriyentasion ta'sir energiyasi quyidagicha hisoblanadi:

$$U_{op} = - \int_0^E p' dE = - \int_0^E \alpha E dE = -\alpha \frac{E^2}{2}$$

$$U_{op} = -\alpha \frac{E^2}{2} \quad (6)$$

Endi o'z yo'nalishi bo'yicha dipolni hosil qilgan maydon kuchlanganligini hisoblaymiz:

$$E = -\frac{e}{r^2} - \frac{e}{(r+l)^2}$$

yoki

$$E = -\frac{e}{r^2} - \frac{e}{r^2 + 2rl} = -\frac{2pr}{r^4 + 2r^3l} \quad (7)$$

kichik miqdor bo'lganligi uchun (7) dagi $2r l$ ni hisobga olmasak ham bo'ladi, natijada:

$$E = \frac{2pr}{r^4} = \frac{2p}{r^3} \quad (8)$$

Oriyentasion qutblanuvchanlik kattaligi:

$$a = p / 3kT.$$

u holda oriyentasion ta'sir energiyasining ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$U_{op} = -\alpha \frac{E^2}{2} = -\frac{p^2}{3kT} \cdot \frac{(2p/r^3)^2}{2} = -\frac{p^2}{3kT} \cdot \frac{4p^2}{2r^6} = -\frac{2p^4}{3kTr^6}$$

$$U_{op} = -\frac{2p^4}{3kTr^6} \quad (9)$$

Agar o'zaro ta'sir etuvchi molekullarning energiyasi har xil bo'lsa, uning oriyentasion energiyasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$U_{op} = -\frac{2p_1^2 p_2^2}{3kTr^6} \quad (10)$$

Energiyaning manfiy ishorasi ikkita dipolning tortishishini ko'rsatadi.

Induksion ta'sir: Xar bir dipol qo'shni molekulada o'z yo'nalishiga mos bo'lgan dipolni induksiyalaydi. Induksiyalovchi molekulaning qutblanuvchanligi a qancha katta bo'lsa, induksiyalangan dipol momenti ham shuncha katta bo'ladi [2-4].

Endi doimiy dipol momentiga ega bo'lgan va induksiya natijasida hosil bo'lgan dipol momentlari o'rtasidagi o'zaro tortishish energiyasini aniqlaymiz. Bizga ma'lumki

$$U_{op} = -\alpha \frac{E^2}{2}$$

edi. Xuddi shuningdek,

$$U_{ind} = -\alpha_{ind} \frac{E^2}{2} = -\alpha_{ind} \cdot \frac{(2p/r^3)^2}{2} = -\alpha_{ind} \cdot \frac{4p^2}{2r^6} \quad (11)$$

$$U_{ind} = -\alpha_{ind} \frac{2p^2}{r^6} \quad (12)$$

Induksion ta'sir birinchi marta Debay tomonidan hisoblangan edi. Shuning uchun ham ba'zan bu ta'sirga Debaycha ta'sir ham deyiladi. Induksion ta'sir, oriyentasion ta'sirdan farqli o'laroq, temperaturaga bog'liq emas.

Dispersion ta'sir: Doimiy dipol momentiga ega bo'lmagan molekulalarning o'zaro ta'sirini hisoblash biroz boshqacharoq. Bunday molekulalar ham o'zaro tortishish xususiyatiga egadirlar, chunki bu xususiyat bo'lmaganda temperaturani pasaytirib, bosimni oshirib gazlarni suyuqlikka aylantirib bo'lmas edi.

Misol: havo bir necha simmetrik molekulalar N_2 , O_2 , CO_2 , Ar larning aralashmasidan iborat. Dipolsiz atom yoki molekulalarning o'zaro ta'sirini faqat kvant mexanikasi asosida tushuntirish mumkin. Londoning ko'rsatishicha, bu ta'sir molekulaning nolinchi energiyaga ega ekanligi bilan bog'liq [2-4].

Biz atomdagi elektronni o'z muvozanat holati atrofida garmonik tebranma xarakterli harakat qiluvchi zarracha yoki ossillyator deb qaraymiz. Atomning dipol momenti nolga teng. Lekin elektronning tebranishi tufayli hosil bo'lgan ossillyator dipol momentining oniy qiymati nolga teng emas. Demak, ossillyatorlar o'zaro ta'sir qilishlari mumkin. Elektronlar o'z muvozanat xolatlaridan chetga chiqqanlarida ossillyatorlarning o'zaro ta'sir energiyasi:

$$U' = -\frac{2e^2 x_1 x_2}{r^3} \quad (13)$$

x_1 x_2 lar - 1 chi va 2 chi elektronning (ossillyatoridagi) muvozanat holatdan chetlanishini xarakterlaydi. Ikkita ossillyatorning o'zaro ta'sir energiyasi shu erkin ossillyatorlarning potensial energiyalari va ularning o'zaro ta'sir energiyalarining yig'indisidan iboratdir:

$$U = U_1 + U_2 + U^1 = \frac{kx_1^2}{2} + \frac{kx_2^2}{2} - \frac{2e^2 x_1 x_2}{r^3} \quad (14)$$

Bu ossillyatorlarning xarakat tenglamalari:

$$\begin{aligned} f &= -\frac{\partial u}{\partial x} \\ f &= mx & mx &= -\frac{\partial u}{\partial x} \\ mx_1 &= -kx_1 + \frac{2e^2}{r^3} x_2 \\ mx_2 &= \frac{2e^2}{r^3} x_1 - kx_2 \end{aligned} \quad (15)$$

Normal tebranishlar chastotasi

$$\omega_{1,2} = k \pm \frac{2e^2}{r^3} / m \quad (16)$$

(16) va (14) formulalarga asosan potensial energiyani quyidagicha yozish mumkin:

$$U = \frac{m}{4} \left\{ \omega_1^2 (x_1 - x_2)^2 + \omega_2^2 (x_1 + x_2)^2 \right\} = \frac{m}{4} \left\{ \frac{k + \frac{2e^2}{r^3}}{m} (x_1 - x_2)^2 + \frac{k - \frac{2e^2}{r^3}}{m} (x_1 + x_2)^2 \right\} \quad (17)$$

quyidagi belgilashlarni kiritamiz:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) = x_1^1 \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2) = x_2^1 \quad (18)$$

natijani quyidagicha yozamiz:

$$U = \frac{m\omega_1^2}{2} x_1^{12} + \frac{m\omega_2^2}{2} x_2^{12} \quad (19)$$

ω_1 - birinchi ossillyatorning tebranish chastotasi;

ω_2 - ikkinchi ossillyatorning tebranish chastotasi.

Kvant mexanikasiga asosan ossillyatorning to'liq energiyasi:

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \nu = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \frac{\omega}{2\pi} \quad (20)$$

$$n=1,2,3\dots$$

to'liq energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$\varepsilon_{n_1 n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \left(\omega_0^2 + \frac{2e^2}{mr^3}\right)^{1/2} \frac{h}{2\pi} + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \left(\omega_0^2 + \frac{2e^2}{mr^3}\right)^{1/2} \frac{h}{2\pi} \quad (21)$$

Agar ossilliyatorlar bo'lmagan, yani erkin bo'lsa u holda ularning to'liq energiyasi:

$$\varepsilon^{(0)}_{n_1 n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \omega_0 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \omega_0 \quad (22)$$

Atom va molekularlar juda past temperaturalarda, yani o'yg'onmagan holda ham o'zaro ta'sir qiladilar. Bunday hol uchun $n_1 = n_2 = 0$ bo'ladi. Natijada energiya quyidagi ko'rinishga ega bo'ladi:

$$\varepsilon_{0,0} = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \left\{ \left(\omega_0^2 + \frac{2e^2}{mr^3}\right)^{1/2} + \left(\omega_0^2 - \frac{2e^2}{mr^3}\right)^{1/2} \right\} \quad (23)$$

Agar $\frac{2e^2}{mr^3} \ll \omega_0^2$ ekanligini hisobga olsak, (10) formulani quyidagicha yozish mumkin:

$$\varepsilon_{0,0} \approx \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \left\{ \left(\omega_0 + \frac{e^2}{mr^3\omega_0} - \frac{e^4}{2m^2r^6\omega_0^3}\right) + \left(\omega_0 - \frac{e^2}{mr^3\omega_0} - \frac{e^4}{2m^2r^6\omega_0^3}\right) \right\} = \frac{h}{2\pi} \omega_0 - \frac{h}{4\pi} \frac{e^4}{m^2r^6\omega_0^3} \quad (24)$$

Lekin o'zaro ta'sir bo'lmaganda ossilliyatoming energiyasi qo'yidagicha aniqlanadi.

$$\varepsilon^0_{0,0} = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} (\omega_0 + \omega_0) = \frac{2}{2} \frac{h}{2\pi} \omega_0 = \frac{h}{2\pi} \omega_0 \quad (25)$$

Demak, (24) va (25) formulalardan ko'rinadiki, o'zaro ta'sir natijasida sistemaning energiyasi quyidagi natijaga teng bo'ladi:

$$U_d = -\frac{h}{4\pi} \frac{e^4}{m^2r^6\omega_0^3} \quad (26)$$

buning ma'nosini tushintirish uchun ω_0 chastota bilan garmonik tebranma harakat qiluvchi ossillyatorning qutblanuvchanligi α ni hisoblaymiz. Agar ossillyatorga tashqi maydon ta'sir etayotgan bo'lsa, u holda unga quydagi kuchlar ta'sir etadi:

1. $F_1 = -kx$ (kavzielastik kuch).

2. $F_2 = eE$ (mexanik kuch). Statik maydon ossillyatorning doimiy siljishini ta'xmin etadi, bu holda yuqoridagi kuchlar muvozanatlanashadi:

$$kx = eE \quad (27)$$

(27) ning ikkala tomonini e ga ko'paytirib, κ ga bo'lamiz:

$$ex = e/kE. \quad (28)$$

$r = ex$ — sistemaning dipol mominti.

Boshqa tomondan, $r = ae$. $R = ex = ae = e/kE$. dan

$$\alpha = \frac{e^2}{k} \quad (29)$$

Ma'lumki, $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, $k = m\omega_0^2$ dan

$$\alpha = e^2 / m\omega_0^2$$

$$U_d = -\frac{h}{4\pi} \frac{\alpha^2 \omega_0}{r^6} = -\frac{\alpha^2}{r^6} \frac{h\nu}{2} \quad (30)$$

Bundan ko'rinadiki, ikkita bir xil qutblanuvchanlikka ega bo'lgan ossillyatorning o'zaro ta'sir energiyasi qutblanuvchanlikning kvadratiga teng. Izolyasiya qilingan alohida nolinchil energiyasiga, yani $h\nu/2$ ga to'g'ri proporsional bo'lib, masofaning oltinchi darajasiga teskari proporsionaldir. (30) dan ko'rinadiki, molekulaning o'zaro tortishishiga sabab nolinchil energiyaning kamayishi, yani kvantomexanik effektdir. Aniq nazariya dispersion ta'sir energiyasi uchun quyidagi natijani beradi:

$$U_d = -\frac{3}{4} \frac{I\alpha^2}{r^6} \quad (31)$$

bu yerda I-atom yoki molekulaning ionizatsiya energiyasi. Agar 2 ta atom va molekulalar o'zaro ta'sirda bo'lsa, u holda (31) formulani quyidagicha yozish mumkin:

$$U_d = \frac{3}{2} \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{r^6} \quad (32)$$

Uchala U_{op} , U_{ind} , U_d kuchlarning yig'indisiga Van-der-Vaals kuchlari ham deyiladi. Shunday qilib, r_0 dipol momentiga va aqutblanuvchanlikka ega bo'lgan molekulaning o'zaro ta'sir energiyasi quyidagilarning yig'indisidan iborat bo'ladi:

$$U = U_{op} + U_{ind} + U_d = - \left(\frac{2}{3} p_0^4 \frac{1}{kT} + 2\alpha p_0^2 + \frac{3}{4} I\alpha^2 \right) \frac{1}{r^6} \quad (33)$$

Agar dipole momenti uncha katta bo'lmasa, ta'sir energiyasi asosan dispersion energiyadan iborat bo'ladi.

Nazariy ravishda hisoblangan dispersion ta'sir energiyasi uning tajribada topilgan qiymatidan farq qiladi. Dispersion ta'sir energiyasini tajribada Van-der-Vaals tuzatmalari va bug'lanish issiqligini bilib hisoblash mumkin. Bu yerda asosiy qiyinchilik itarish kuchlarini hisobga olishdir. Shunga qaramasdan nazariy va tajriba yo'li bilan topilgan dispersion ta'sir energiyasi bir xil kattalikka egadir.

$$\alpha_B = \frac{4\pi^2}{9} \cdot N_A^3 / U_d / r^6 \quad (34)$$

Molekulalararo ta'sir kuchlari 3-5 Å masofalarida katta bo'lib, masofaning oshishi bilan bu kuchlar tez kamayadi. 3-5 Å masofa suyuq holdagi moddaning molekulalari o'rtasida bo'ladi.

Agar ikki zarraning o'zaro ta'sir kuchi F faqat ular orasidagi masofaga bog'liq bo'lsa bunday kuchga markaziy kuch deyiladi. Bunga misol qilib inert gazlar molekulalari orasidagi ta'sir kuchlarini ko'rsatish mumkin. Umumiy holda F kuch faqat zarralar orasidagi masofaga bog'liq bo'lmasdan, balki ularning o'zaro oriyentatsiyasiga ham bog'liq bo'ladi.

Ikkita zarra o'zaro ta'sirini harakterlovchi potensial energiyani U bilan belgilaymiz. Molekulalar bir-biridan cheksiz uzoq masofaga joylashgan bo'lsa U

ningga intiladi. Markaziy o'zaro ta'sir holida F va U o'zaro quyidagicha aloqada bo'ladi.

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} \quad (35)$$

$$U(r) = \int_r^{\infty} F(r) dr \quad (36)$$

O'zaro ta'sir potensial energoyaning potensial qiymati-potensial o'ra chuqurligni s bilan belgilaymiz.

Ikkita zarra o'rtasidagi muvozanat masofa d_0 ga teng bo'lganda

$$U(d_0) = -\varepsilon \quad (37)$$

$$F(d_0) = -\frac{dU}{dr} \quad r = d_0 = 0 \quad (38)$$

$r < d_0$ bo'lgan holda $F(r) > 0$ va molekulalar bir-birini itaradi. Ammo $r > d_0$ bo'lganda $F(r) < 0$ bo'lib, bu holda molekulalar bir-birini tortadi.

O'zaro ta'sir etuvchi ikkita molekulalarning radiuslarini shartli ravishda r_1 va r_2 ga teng deb olsak, $\sigma = r_1 + r_2$ kattalik bir xil molekulalar uchun molekulaning diametriga teng bo'ladi.

Qutbsiz va sferik shaklga ega bo'lgan molekulalarning o'zaro juft ta'sirini harakterlovchi Lennard-Jons potentsiali quyidagi ko'rinishga ega.

$$U = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (39)$$

Bu tenglik $r > \sigma$ bo'lganda bajariladi. Agar $r < \sigma$ bo'lsa, $U = \infty$ bo'ladi. Van-der-Vaal doimiysi v va σ o'zaro quyidagicha bog'langan:

$$\varepsilon = \frac{2}{3} \pi N_A \cdot \sigma^3 \quad (40)$$

N ta atomdan tashkil topgan molekulalarda atomlar qandaydir kuch ta'sirida ushlab turiladi. Bu kuchlar uncha katta emas va shuning uchun molekulalar absolyut qattiq bo'lmasdan atomlar o'zining muvozinat vaziyati atrofida kuchsiz tebranadi.

Agar vodorod atomi molekulada kuchli elektro manfiylikka ega bo'lgan atom bilan kimyoviy birikkan bo'lsa, u boshqa molekulaning yoki xuddi shu molekulaning boshqa manfiy zaryadi atomi bilan y ana bir qo'shimcha bog'lanishlar hosil qiladi. Lekin bu ikkinchi bog'lanish oddiy bog'lanishga qaraganda bo'sliroq bo'ladi. Bn turdagi bog'lanishga vodorod bog'lanish deb nom berilgan. Vodorod atomining bir vaqtning o'zida ikki bog'lanish hosil qilish qobiliyati XIX asming oxirida aniqlangan edi. Vodorod bog'lanish shartli A-N...V deb belgilanadi. Bunda A-N bog'lanishdagi elektronlarning zichligi (umumiy elektron jufti) A atomiga tomon kuchli siljigan bo'ladi. Buning natijasida vodorod atomi yaqinida elektronlar juda ziyrak bo'ladi, ya'ni yalang'ochlangan protonning yakka o'zi qoladi va ajoyib xususiyatlarga ega bo'ladi. Slmning uchun ham vodorod ionii boshqa molekulaning manfiy zaryadli V atomiga tortiladi. Boshqa atomlar esa V ga yaqinlashganda itarishadi, chunki V ning manfiy zaryadi bilan molekulaning elektron qobig'i ta'sir qilishadilar [5].

O'zaro ta'sirlashuvi atom V ning zaryadi qancha katta bo'lsa, o'lchami qancha kichik va A-N kovalent bog'lanishda qatnashuvi 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 ham kamroq.

Masalan ftorli birikmalarda bu bog'lanish energiyasi 10 kkal/molnii tashkil qilsa, S-N... V tipidagi komplekslarda 2-3 kkal/molnii taslikil qiladi. Shunday qilib spesifik o'zaro ta'sir bir yoki turli xil molekulaning ikkita funksional gruppasini o'z ichiga oladi.

Bu gruppalardan biri A-N proton beruvchi (proton donor) ikkinchisi V esa proton qabul qiluvchi (akseptor) deyiladi. Odatda donor proton sifatida gidroksil gruppalar (O-N) aminogruppalar (N-H) bo'ladi. Akseptor esa karbonil grappalardagi FCl va hokazolar bo'lishi mumkin.

Agar N bog'lanish A-N va V guruhlarda bir turli va har xil turli ikki yoki undan ko'proq molekulalar orasida yuz bersa buni molekulalararo N-bog'lanish deyiladi. N-bog'lanish bir birkma molekulalari orasida yuz holatlari ham bo'ladi.

Bunday bog'lanishni ichki molekulalar N-bog'lanish deyiladi. Molekulalararo va ichki molekulalar bog'lanishga qo'yidagilarni misol qilib ko'rsatish mumkin.

Molekulalararo vodorod bog'lanishlar turli tarkibdagi qo'shilmalarning hosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Vodorod bog'lanishning eng ko'p turi ya'ni bir birikmaning ikki molekulasi orasida yoki ikki har xil birkma molekualalari orasida 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 trimmer, tetramer va x.k. bo'lishi mumkin.

Molekulalararo vodorod bog'lanish ko'pchilik organik birikmalar uchun xosdir. Masalan, O- nitrofenolda ichki molekulalar vodorod bog'lanish bor. Parametrofenolda esa molekulalararo bog'lanish chunki bu birikmalar O-N guruxining vodorodi nitroguruxi kislorodidan uzoqlashgan bo'ladi.

Vodorod bog'lanish ko'pgina fizik-ximik proseslarda mulim rol o'ynaydi, hamda moddaning xossalari belgiyadi. Bu bog'lanish N atomi bo'lgan deyarli hamma moddaning liir kanday agregat holatida uchraydi. Keyingi yillarda vodorod bog'lanish haqidagi fikrlardan foydalangan Yangi sohalar viijudga kelmoqda va taraqqiy etmoqda. Masalan, adsorbsiya kataliz, fermentlar aktivligi va x.k.

Vodorod bog'lanish tirik organizmda ham namoyon bo'ladi. Inson o'zi ham vodorod boglanishli 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.

Kaqqatdan ham bu bog'lanishlar oqsil va nuklein kislotalar tuzilishida o'ziga xoslikni aniqlaydi va sintetik polmerning ko'pchiligida muhim rol o'ynaydi.

Toza moddada yoki eritmada molekulalararo vodorod bog'lanishlarning hosil bo'lishi moddanining ko'p fizikaviy xossaligining o'zgarishiga olib keladi. Moddalaraing tuzilishini molekulyar qo'shilmalarning hosil bo'lishiga sabab bo'lishi o'zaro ta'sir kuchlari to'liq aniqlaydi. Moddalar qo'shilishida ularning

xossalari odatda kuchli o'zgaradi va qo'shilishdan oldin hosil bo'lgan moddalarning xossalari ancha farq qiladi.

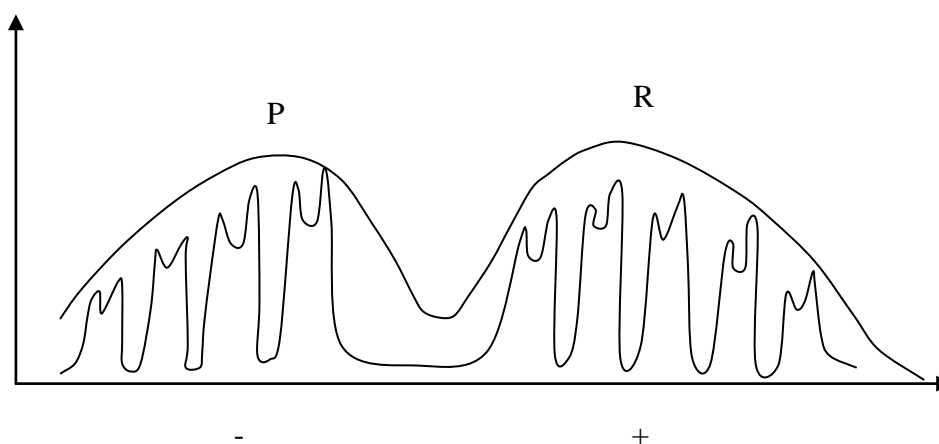
1.2. MOLEKULALARO O'ZARO TA'SIR VA UNING SPEKTRDA NAMOYON BO'LISHI

Molekulalarning spetrokopik parametri deganda uning chastotasi polosaning yarim kengligi, intensivligi va hokozolar tushuniladi. Molekula bir agregat holatdan boshqa bir agregat holatga o'tganda uning spektral parametrlari ma'lum miqdorda o'zgaradi. Molekula faqat siyraklashtirilgan gaz holatida bo'lgandagina uning spektral parametrlari molekuladagi real harakatlarga tegishli bo'lgan o'tishlarni xarakterlashi mumkin. Gaz holatdagi molekulalarning zinchligi orta borishi bilan esa molekulalararo o'zaro ta'sir hisobiga spetrokopik parametrlar o'zaro boradi. Bu o'zgarishlar qo'yidagicha namoyon bo'ladi:

- 1) yutilish va nurlanish polosasi siljiydi;
- 2) polosaning intensivligi o'garmaydi;
- 3) polosaning formasi o'zgaradi (yarim kengligi, simmetrikligi)
- 4) yangi polosalar paydo bo'ladi [5-6].

Ayniqsa modda gaz holatdan kondinsatsiyalangan holatga o'tganda (suyuq yoki qattiq) bu effektlar kuchliroq namoyon bo'ladi. Bu effektlarning qanchalik kuchli yoki kuchsiz namoyon bo'lishi molekulaning qutbli yoki qutbsizligiga, molekulalararo o'zaro ta'sirga qanchalik moyilligiga bog'liq. Masalan ikki atomli HCl molekulasining tebranish spektrida P va R qanotlardan tashkil topgan aylanma strukturaga ega bo'lgan spektr ko'zatiladi. Agar gazning zichligini oshirsak u holda aylanma tebranma strukturaga ega bo'lgan chiziqlar bir biriga ko'shib P va R qanotdan tashkil topgan polosa kuzatiladi.

HCl molekulasining turli erituvchilardagi spektron parametrlari quyidagi jadvalda keltirilgan.



2-rasm. HCl molekulasining tebranish spektri

	Gaz	Ar (T=90 K)	Kr (T=120K)	Xe (T=180K)	CCl ₄ (T=300K)	Xe (T=200K)
ν (cm ⁻¹)	2886	2869	2861	2848	2833	2550
A (cm ⁻² s ⁻¹ mol ⁻¹)	19	27	34	50	47	57

$$A = \frac{c}{Nl} \int l_0 \tau(\nu) \frac{\frac{cm}{cm^3} \frac{cm^{-1}}{cm}}{\frac{molek}{cm^3} \frac{cm}{cm^3}} = cm^{-2} cek^{-1} molek^{-1} \quad (9)$$

Molekulararo o'zaro ta'sirning turlicha turlari mavjud bo'lib ularni umumiy holda 2 gruppaga bo'lish mumkin.

Universal va simmetrik.

Universal o'zaro ta'sir deyarli hamma vaqt mavjud bo'lib unga Van-der-Vaals kuchlari kiradi, bu tortishish va itarish, oriyentatsiyalanish, induksion, dispersion tabiatga ega bo'ladi.

Universal o'zaro ta'sir ma'lum bir yo'nalishga ega bo'lmaydi. Molekulararo o'zaro ta'sirning energiyasi o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning fizik

xossalariga (dipol moment, qutblanuvchanligiga bog'liq bo'lib) ~ 1 kkal/mol ni tashkil qiladi [5].

1.3§. Vodorod bog'lanish va uning tebranish spektrida namoyon bo'lishi

Molekulada atomlar orasida ximiyaviy kuchlar ta'sir qiladi. Bu kuchlar elektrostatik tabiatga ega bo'lib, atomlarning elektron strukturasi bog'liq.

Moddaning kondensirlangan (suyuq yoki qattiq) holati atom va molekulalar orasida o'zaro tortishish kuchlari mavjudligidan dalolat beradi. Masalan, suyuq geliy, argon va hokazolar atomlar orasidagi o'zaro tortishish kuchlarining mavjudligiga misol bo'ladi. Bundan tashqari atom va molekulalar orasida itarishish kuchlari ham yuzaga keladiki, ularni ma'lum holatdan so'ng hajmini kichraytirib bo'lmaydi [7].

Atom va molekulalar orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari birinchi navbatda Van-der-Vaals kuchlari bo'lib ularning energiyasi 0,1 dan 2 kkal/mol gacha bo'lishi mumkin. Van-der-Vaals kuchlari o'z navbatida oriyentatsion (dipol-dipol), induksion va dispersion kuchlarga bo'linadi. Dipol-dipol o'zaro ta'sir qutbli molekulalar orasida vujudga keladi. Bunda dipol momentiga ega bo'lgan bir molekula ikkinchi dipol momentiga ega bo'lgan molekulaning elektr maydonida orentirlanadi. Dipol momentiga ega bo'lmagan molekulalarda Debay nazariyasiga ko'ra yuqori multipol (kvadrupol, oktupol momentlar) bo'ladi. Yoki bir molekulaning dipol momenti ikkinchi molekulani elektr maydonini induksiyalaydi. Natijada induksion o'zaro ta'sir vujudga keladi. Indusirlangan dipolning oriyentatsiyasi xaotik bo'lmasdan, doimiy dipolning yo'nalishi bilan aniqlanadi. Oriyentatsion o'zaro ta'sir temperaturaga bog'liq bo'lib induksion o'zaro ta'sir temperaturaga bog'liq bo'lmaydi. Bu hollarda molekulalararo o'zaro ta'sir energiyasi ular orasida masofaning oltinchi darajasiga teskari proporsional bo'ladi. Bundan tashqari inert gazlar molekulalari orasida ham o'zaro ta'sir mavjud. Vaholanki, ularning elektron buluti sferik simmetrik bo'lib hech qanday elektrik dipolga ega emaslar, ular orasida induksion effekt ham vujudga kelmaydi. Atomlar

yoki qutbsiz molekular o'rtasida vujudga keladigan o'zaro ta'sirni dispersion o'zaro ta'sir deyish mumkin. Sistemaning potensial energiyasining kamayish miqdori dispersion o'zaro ta'sir energiyasi bo'ladi, vujudga kelgan kuch dispersion kuch deyiladi. Bu kuchning kattaligi sistemaning qutblanuvchanligiga bog'liq. London nazariyasiga ko'ra dispersion o'zaro ta'sirning tabiati nolinci energiyaning mavjudligi bilan bog'liq. Bundan tashqari molekular o'rtasida rezonans o'zaro ta'sir ham vujudga keladi [8-9].

Molekulaning spektral parametrlari deganda spektral chiziqning chastotasi, yarim kengligi va formasi tushuniladi. Molekular o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir kuchlari molekulaning spektral parametrlarini bir muncha o'zgartiradi. Spektral chiziqning chastotasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir natijasida siljiydi (ko'p hollarda past chastotaga tomon) va uning yarim kengligi ortadi. Spektral chiziqning formasi tabiatan simmetrik bo'lishi lozim. Uning assemmetrik ko'rinishga ega bo'lishiga ham asosan molekular o'rtasidagi Van-der-Vaals o'zaro ta'siri sabab bo'ladi.

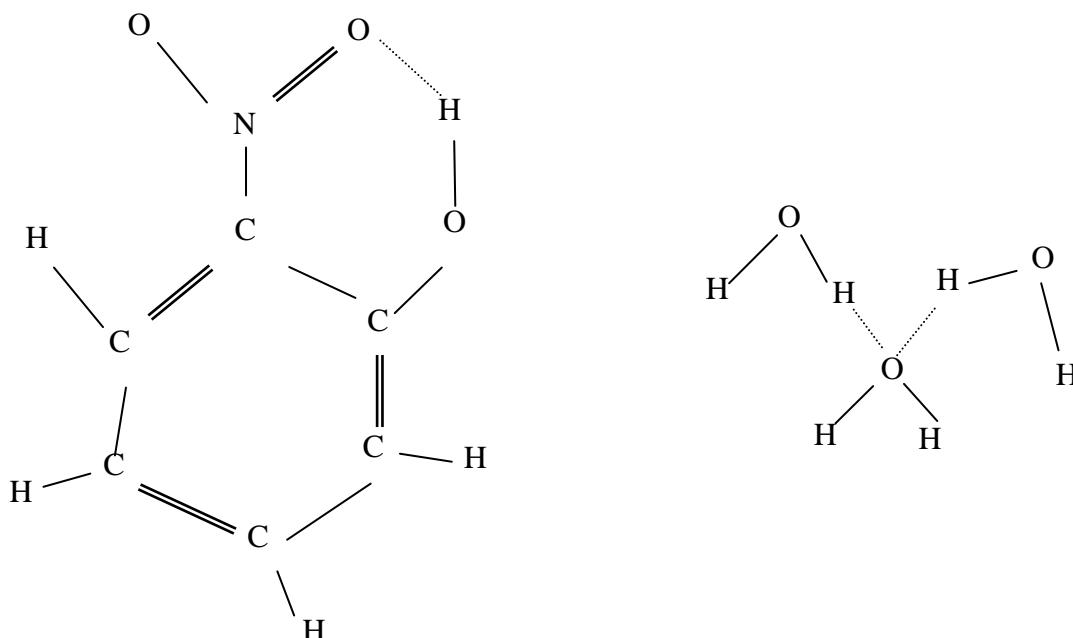
Molekulararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan biri vodorod bog'lanishdir. Bir molekula tarkibida ximiyaviy bog'langan vodorod atomi boshqa molekulaning elektromanfiy guruhi bilan yana qo'shimcha bog'lanish hosil qiladi. Bu bog'lanishga vodorod bog'lanish deyiladi. Vodorod atomining bir vaqtda ikkita bog'lanishda qatnashishi xususiyati XVIII asr oxirida ma'lum bo'lgan [7].

Vodorod bog'lanish bitta molekula ichida bo'lishi mumkin. Bunga ichki molekulyar vodorod bog'lanish deyiladi. Masalan, orto-xlorfenol, orto-nitrofenol va hokazo molekularlarda ichki molekulyar vodorod bog'lanish kuzatiladi.

Vodorod bog'lanish bir xil yoki turli xil molekular orasida bo'lishi mumkin. Bunga molekulararo vodorod bog'lanish deyiladi.

Bu bog'lanishning tabiati quyidagicha: vodorod atomi ximiyaviy bog'lanish jarayonida o'zining yagona elektronini boshqa atomga beradi va u atomning elektron qobig'ini to'ldiradi. Natijada vodorod atomining protoni yalang'och

bo'lib qoladi. Agar bu protonga biror tomondan elektromanfiy atom yaqinlashsa u bilan o'zaro tortishadi.



3-rasm

Vodorod bog'lanishni odatda A-H...B ko'rinishda belgilaydi. A-H guruh protonni beruvchi – donor, B guruh esa protonni qabul qiluvchi – akseptor deyiladi [8, 10].

Vodorod bog'lanishli komplekslarni enregiyasiga qarab shartli ravishda 3 guruhga bo'lish mumkin:

1. Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 1-2$ kkal/mol.

Masalan $H\text{Gal} \dots H_2$, $H\text{gal} \dots SO$

2. Tipik vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 2-8$ kkal/mol.

Masalan suv, geloidovodorodlar dimer yoki polimerlari ...

3. Kuchli vodorod bog'lanishli komplekslar $\Delta H \sim 9 \div 30$ kkal/mol.

Bunga karbon kislotalari, fosfororganik birikmalar va hokazo misol bo'lishi mumkin [6].

Kvanto-ximik hisoblashlar natijasida tajribalarda spektrlarini tekshirish orqali turlicha agregatlarning molekulyar karakteristikalarini aniqlash

imkoniyatlari paydo bo'ldi, bundan tashqari agregatlangan bog'lanishlarda molekulalarning fazoviy tuzilishi va orientatsiyasi aniqlash imkonini beradigan usullar yaratildi. Shunday qilib, molekulalararo komplekslar modelida tajriba natijalar nazariy hisoblashlar orqali tushuntirish bugungi kunda gaz va suyuq holatlar fizikasining eng dolzab vazifalaridan biri bo'lib qoldi.

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'ektlar uchun, vodorod bog'lanish va Van-der-vaals molekulalararo o'zaro ta'sirlar orqali hosil bo'ladigan molekulyar agregatlarni o'rganishda yangi eksperimental tadqiqotlar va kvanto-ximik hisoblashlar o'tkazish yo'li bilan ularning "spektri, tuzilishi va xossalari" orasidagi bog'lanishlarni o'rnatish hamda molekulalararo o'zaro ta'sirlarni, molekulalar agregatlanishini va ularni o'rab turgan muhitning molekulaning spektral parametrlariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega.

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan yana biri vodorod bog'lanishlardir. Agar vodorod atomi molekuladan 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 [5-7].

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 fluor bilan kislorod birikmalarida eng kuchli bo'ladi, azotda kamroq, xlor bilan oltingugurtda yana ham kamroq bo'ladi. A-H...B o'zaro ta'sirning kuchiga qarab H bog'lanishning energiyasi ham o'zgaradi.

Masalan, fluorli birikmalarda bu bog'lanish energiyasi 10 kkal/mol ni tashkil qilsa, C-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 fluor, xlor va hokozolar bo'lishi mumkin.

Agar vodorod bog'lanish A-H va B guruhlari 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 molekulalari 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 molekulasi orasida bog'lanishlardan iborat. Hosil bo'lgan komplekslar demirlar 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 hokozo 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.

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, adsorbtsiya kataliz, fermentlar aktivligi va hakoza.

Vodorod bog‘lanish tirik organizimda 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 nechitasi bo‘lishi mumkin.

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 xossalarining o‘zgarishiga olib keladi. Moddalarning tuzilishini, molekulyar qo‘shilmalarning 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 moddalarning xossalaridan ancha farq qiladi. Chunki vodorod bog‘lanish molekulalarning faqat massasi, o‘lchamlari va shakligina emas, funksionlar 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, dielektiklar 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 sochilaish spektrida chastotalarning siljishiga UaMR spektorida esa signallarning siljishiga olib keladi [11].

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

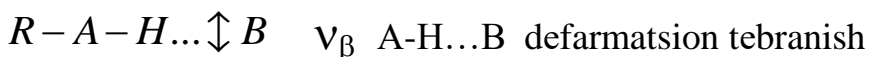
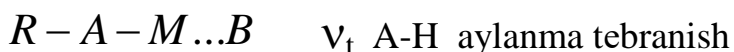
Demak vodorod bog‘lanish molekulararo o‘zaro ta’sirlarning bir turi bo‘lib, uni bir molekulaning vodorod atomi bilan ikkinchi molekulaning xuddi shu molekulaning manfiy zaryadli atomlari hosil qiladi.

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 Ua MR spektrlari yordamida olib boriladi.

Vodorod bog‘lanish sistemalari infraqizil yutilish va kombinatsion sochilish bo‘yicha to‘plangan katta materiallar asosida tebranish spektriga qarab vodorod bog‘lanishning hosil bo‘lishini aniqlash imkonini beruvchi bir qator belgilari aniqlangan. A-H...B tipdagi vodorod bog‘lanish hosil qilganda ham A₂H, A-H bog‘lanishning ham B guruhlarining chastotalari o‘zgaradi. Bunda quyidagi tebranishlar kuzatiladi



ν_s, ν_t, ν_β - tebranishlar R-A-H molekulada vodorod bog‘lanish bo‘lmaganda ham mavjud bo‘ladi. ν_s ba ν_β - tebranishlar esa vodorod bog‘lanish bo‘lgandan keyin hosil bo‘ladi [10].

Vodorod bog'lanishning tebranish spektrida kuzatiladigan asosiy spektrlar belgilari quyidagilardir:

I. A-H guruhining valent tebranishi - ν_s

1. Valent tebranish palasasi va uning obertonlari past chastotaga siljiydi. Ko'plab sistemalarda bu siljish miqdorining o'nlab foizini tashkil qiladi.
2. a) Infraqizil yutilish spektrida vodorod bog'lanish palasa integral intensivligining ortishiga olib keladi. Uning obertonining intensivligi esa kam o'zgaradi.
b) Kombinatsion sochilish spektrida ν_s - ning intensivligining o'zgarishi haqida ishonchli tajribalar deyarli yo'q. Nisbiy intensivligi qisman ortadi.
3. Temperaturaning qisman o'zgarishi ν_s palasaning chastotasida va intensivligining keskin o'zgarishiga olib keladi.
4. Turli xil erituvchilar ham ν_s palasaning parametrlariga ta'sir qiladi.

II. R A-H guruhining ν_d defarmatsion tebranishi.

1. ν_d defarmatsion tebranish palasasi chastotasi erkin molekula chastotasiga nisbatan yuqoriga siljiydi. Bu holda nisbiy siljish uncha katta bo'lmaydi.
2. ν_d tebranish palasaning yarim kengligi va intensivligidan farqli ravishda unchalik o'zgarmaydi.

Vodorod bog'lanishning o'ziga tegishli bo'lgan yangi past chastotali tebranishlarning paydo bo'lishi, bu uzoq infraqizil oblastida kuzatiladi.

Vodorod bog'lanish molekularning aylanma va ilgarilanma erkinlik darajalari sonining kamayishiga olib keladi va yangi tebranma erkinlik darajasi vujudga keladi. Valent va defarmatsion tebranish chastotasi $20-200\text{cm}^{-1}$ oblastda yotadi.

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.

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 [12-13].

Vodorod bog'lanish tebranma spektrida A-H valent tebranish palasasining past chastotalarga tomon siljishiga olib keladi. Qo'shni molekulalarning proton donorlik va proton akseptorlik qobiliyatlariga qarab siljishning kattaligi 10sm^{-1} dan minglab sm^{-1} gacha o'zgaradi.

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

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

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.

Adabiyotlarda vodorod bog'lanishli kompleks chiziqlarning formasi to'g'risida to'rtta umumiy nazariya muxokama qilinadi.

1. O'ta dissosiatsiya.
2. Chastota modulyatsiyasi.
3. Fermi rezonansi.
4. Fluktatsion nazariya.

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 har holda o'ylash tabiidir.

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

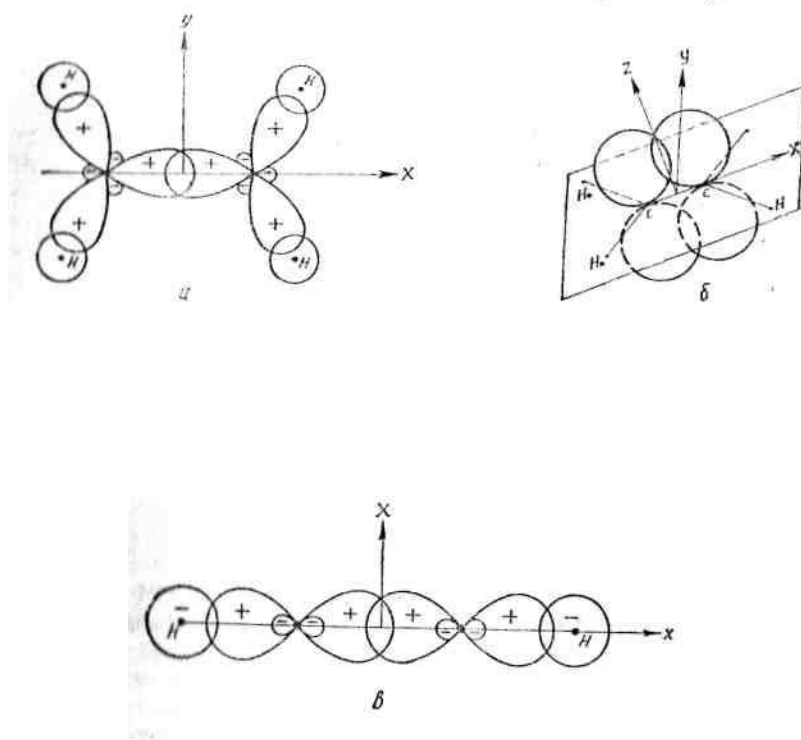
Oxirgi yillarda kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarini o'rganish uchun matritsali izolyatsiya deb ataladigan yangi usul muvofaqqiyatli ravishda qo'llanilmoqda. Bu usul vodorod bog'lanishli modda bilan ko'p miqdor inert gaz aralashmasini diffuziya yuz bermaydigan haroratda tez sovutishdan iborat. Sovutilgan ideal gaz shunday qattiq matritsani hosil qiladiki, unda kondensatsiya vaqtida mavjud bo'lgan barcha asossiatsiyalar izolyatsiyalanadi.

σ va π Bog'lanishlar

Ma'lumki, uglerod atomlari o'zaro birikkanda $C-C$, $C=C$, $C\equiv C$ bog'lanishlarni yoki azot atomlari $N\equiv N$ bog'lanishni hosil qiladi. $C-C$ bog'lanishda bog' bir juft, $C=C$ bog'lanishda ikki juft, $C\equiv C$ bog'lanishda esa uch juft elektrondan iborat. Bu bog'lanishlarda valentlik qanday yo'nalgan?

Uglerod to'rt atom bilan birikib, to'yingan birikma (CN_4 , CCl_4) hosil qilganda valentlik ikkala atom yadrosining markazini birlashtiruvchi o'q bo'ylab yo'naladi, valentlik bog'ini hosil qilgan elektronlar esa shu o'qqa parallel bo'lgan tekislikda harakat qiladi. Bunda elektronlar buluti o'zaro ko'proq qoplanadi va energetik jihatdan afzal bo'ladi. Xuddi shuningdek, $C-C$ bog'lanishini hosil qilgan elektronlar ham bir chiziqda joylashgan bo'ladi, Bu bog'lanish σ bog'lanish (sigma boglanish) deyiladi. σ bog'lanishi s elektronlari bor atomlarda shu atomning ikkita s elektroni o'rtasida (N_2 , Li_2), p elektronlari bor atomlarda esa ularning ikkita p elektroni o'rtasida (Cl_2 , Br_2 , I_2) va nihoyat, bir atomning s elektroni bilan ikkinchi atomning s elektroni yoki gibridlangan elektron o'rtasida hosil bo'lishi mumkin. Umuman aytganda, yakka bog' doimo σ bog' bo'ladi.

Endi $C = C$ bog'lanishni ko'rib chiqaylik. C_2N_4 da har qaysi uglerod atomi uchta qo'shni atom (ikkita N va bitta C atomi) bilan o'raladi va ularning hammasi bilan σ bog' hosil qiladi. Lekin har qaysi uglerod atomida bittadan juftlanmagan p elektron ortib qoladi. Uglerod atomlari orasidagi ikkinchi bog' $2p$ elektronlardan hosil bo'ladi. p elektronlarning buluti "8" shaklida bo'lib, ikkinchi bog' σ bog'ga nisbatan tik joylashadi, ya'ni p elektronlar ikki atom yadrosini birlashtirish o'qqa nisbatan tik tekislikda harakat qiladi. Bu bog'lanishga π bog'lanishi (pi bog'lanish) deb ataladi. Kvant mexanikasi asosida qilingan hisoblash bog'lanishning bunday yo'nalishida elektronlar buluti o'zaro mumkin qadar ko'proq qoplanishini ko'rsatdi [14].



4-rasm C_2H_4 , C_2H_2 molekularining tuzilishi

$C=C$ bog'lanishda bitta σ bog', bitta π bog', $C\equiv C$ bog'lanishda bitta σ bog' va ikkita π bog' va nihoyat, $N\equiv N$ bog'lanishda bitta σ bog', ikkita π bog' bor. Umuman, atomlar orasidagi bog'lar soni birdan ortiq bo'lsa, ulardan bittasi σ bog', qolganlari esa π bog' bo'ladi. Shuni ham aytish kerakki, σ va π bog'lar

doimo bir-biriga nisbatan tik joylashgan bo'ladi. 4- *a*, *b*, *v*- rasmlarda C_2H_4 , C_2H_2 molekulalarining tuzilishi sxematik ravishda ko'rsatilgan.

π bog'lanishda elektronlar buluti σ bog'lanishdagiga qaraganda o'zaro kamroq qoplangan bo'ladi. Shu sababdan σ bog'lanish π bog'lanishdan ko'ra mustahkamroqdir. C—C bog'ining energiyasi 69 kkal/mol ga, C=C bog'ining energiyasi esa 100 kkal/mol ga teng. Binobarin, π bog'ning energiyasi taxminan 40 kkal/mol ga teng. Demak, σ bog' π bog'ga nisbatan 1,5 marta mustahkamroqdir. C_2N_4 molekulasida uchta $s p^2$ —orbita bir tekislikda bir-biriga nisbatan 120° burchak hosil qilib joylashgan. Shunga ko'ra, C_2N_4 - molekulasi tekis bir yuzada joylashgan. Bitta π bog' esa bu tekislikka tik yo'nalgan. C_2N_2 molekulasida ikkita σ bog' bir tekislikda o'zaro 180° burchak hosil qilib joylashgan. Ikkita π bog' bir-biriga tik joylashgan. Shu sababdan tarkibida uglerod atomi bo'lgan molekulaning fazoda joylanishi uglerod atomini o'rab olgan atomlarning soni bilan belgilanadi. Uglerod atomi to'rt atom bilan o'ralganda (CN_4 , CCl_4) molekula tetraedr tuzilishida bo'ladi. Uch atom bilan o'ralganda hamma atom bir tekislikda joylashadi ($N_2C=CN_2$, RCOR va hokazo), ikki atom bilan o'ralganda esa atomlar bir to'g'ri chiziqda yotadi (asetilen birikmalari, KCN va hokazo). σ , π — bog'lar to'g'risida sxematik tasavvur berdik. Aslida esa bu hol bir oz murakkabroq bo'lib, σ , π - elektronlarning yuzada emas fazoda harakat qilishini tasvirlashi kerak [14].

1.4 Vodorod bog'lanishli komplekslarning fizik parametrlarni kvantoximik hisoblashlar orqali o'rganish

Tajriba yo'li bilan olish mumkin bo'lmagan natijalarni ham kvantoximiyaviy hisoblash yo'li bilan aniqlash imkonini byeradigan va juda tez ishlaydigan kompyuterlar paydo bo'lishi bilan bu sohaga yanada qiziqish kuchaydi. Kvantoximiyaviy hisoblash usullari takomillashtirilib, bugungi kunda murakkab sistemalarning tuzilish mexanizmlari to'g'risida ma'lumot olish uchun bu usullardan keng foydalanib kelinmoqda.

Kvanto-ximik hisoblashlar natijasida tajribalarda spektrlarini tekshirish orqali turlicha agryegatlarning molyekulyar harakteristikalarini aniqlash imkoniyatlari paydo bo'ldi, bundan tashqari agryegatlangan bog'lanishlarda molyekulalarning fazoviy tuzilishi va orientatsiyasi aniqlash imkonini byeradigan usullar yaratildi. Shunday qilib, molyekulalararo komplekklar modyelida tajriba natijalar nazariy hisoblashlar orqali tushuntirish bugungi kunda gaz va suyuq holatlar fizikasining eng dolzab vazifalaridan biri bo'lib qoldi.

Suyuq muhitlarda, tanlab olingan ob'yyektlar 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 paramyetrilariga ta'sirini o'rganish juda katta amaliy ahamiyatga ega.

Amaliy masalalarni noemperik hisoblashlar o'tkazish orqali hal qilish jarayonida quyidagi masalalarga e'tibor qaratish talab etiladi:

Tayyor dasturlar asosida o'tkaziladigan noemperik hisoblashlar usulini tanlab olish. Molyekulaning tyermodinamik va spektroskopik paramyetrilarini aniqlaydigan zamaonaviy noemperik hisoblashlarning aniqlik darajasi. Molyekulyar tuzilishini o'rganishda va amaliyotda hisoblashlar natijalaridan foydalanish darajasi.

Noemperik hisoblashlar bilan spektroskopik usullar bir-birini to'ldirgan holda o'rganilayotgan ob'yyekt to'g'risida to'liq ma'lumot olish imkoniyatini yaratadi. Umumiy qilib aytganda, noemperik hisoblashlar taklif qilingan modyelning o'lchangan natijalar bilan adyektivatligini ta'minlash uchun molyekulyar sistyemalarda ma'lum bir yaqinlashishlar orqali Shryedinyer tyenglamasining yyechimini topish jarayoni dyeb qarash mumkin.

Noemperik hisoblashlarning kelib 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 mehanikasi yadro-elektron sistemalar tuzilishini aniqlash va ular xossalarini hisoblash usullarini yaratilishiga asos bo'ldi. Molekulalarda elektron va yadrolar harakatini ajratish Bron va Oppengeymer (1927) va boshqalarning ishlarida asoslab berildi.

Tajriba orqali olish mumkin bo'lmagan, murakkab molyekulyar tuzilmalarning va effyektlarning xossalarini hisoblash uchun ko'pincha noemperik 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 [12]. 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 bazasini hosil qiluvchi orbitallar beriladi. Elektron energiyasi va to'lqin funksiyasi hisoblanadigan molekula yadrolarning geometrik konfiguratsiyalari to'plami ajratib olinadi. Masalan NSI molekulasining

dissosiyatsiya 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, variatsion usullar yordamida elektronlar harakatining muvofiqlashtirilganligi-elektron korrelyatsiyani hisobga 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 [15]. 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 paragraflarda batafsil keltirilgan.

Bugungi kunda noemperik 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 noemperik 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 [15].

Noemperik 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.

Taklif qilingan 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 bir elektron korrelyatsiyani 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 noemperik yoki ab initio deb ataladi [12].

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 [12-16]. Noempirik hisoblashlar bugungi kunda turli xil bazis qatorlariga ega bo'lgan Xartri-Fok sxemasiga asoslanadi. Molekulyar sistemaning xossalari aniqlash bazis qatori va korrelyatsion effektlarga monoton bog'liq bo'ladi [12-16]. Misol uchun, noemperik hisoblashlar o'tkazish mumkin bo'lgan GAUSSIAN [16] dasturida turli xil atom orbitallari-bazislar to'plamini tanlash imkoniyati mavjud. Noemperik 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, noemperik hisoblashlarning asosiy maqsadi molekula tuzilishi va energiyasini bashorat qilishdan iboratdir. Hisoblash usulini tanlash quyidagilarni aniqlashga qaratilgan bo'ladi:

- Teng og'irlikdagi geometrik tuzilish;
- To'liq elektron energiya;
- Potensial sirdagi lokal minimumga to'g'ri keluvchi garmonik chastotalar to'plami.

Ushbu keltirilgan natijalarni hisoblash quyidagi ketma ketlikda amalga oshiriladi: Birinchi bo'lib, boshlang'ich geometrik tuzilish bitta determinantli Xartri-Fok usuli bilan 6-31G* (HF/6-31G*) bazislar to'plamida amalga oshiriladi [17]. Zaryadlar, dipol moment hisoblanadi va oxirgi qadamda garmonik chastotalar va umumiy energiya hisoblanadi. Chastotlar 6-31G*(Xartri-Fok strukturasi) [17] orqali hisoblanib, nazariyaga asosan tajriba natijalari bilan mos kelishini ta'minlash maqsadida 0.8929 faktorga ko'paytiriladi.

II BOB. AMALIY QISM

2.1. Tanlab olingan moddaning xususiyatlari.

Spirtlarda molekulalararo ta'sirni o'rganish model sistema sifatida qaralib, aloqa qonuniyatini paydo bo'lishi va xarakterli tarizda kuchli assotsiyatlarda suyuq holatda fazoda suyuqliklar molekulasini aniqlashda muxim ahamiyatga ega. Bu muammo bitiruv ishida propiloviy spirti misolida echilib, pripiloviy spirt idial sistema sifatida ko'rib chiqildi. Suyuq holatdagi moddalar ustida o'tkazilgan tadqiqot ishlari har xil, yani biologiya sohasida meditsina sohasida bular qatorida zamonaviy molekulyar spektroskopiya sohasida o'rganish uchun imkoniyat yaratdi. Spirtlarni o'rganish tadqiqotlari molekulalarning o'zaro ta'siri va moddalarning strukturasi turli kondensatsiya xolatidagi xususiyatlarini o'zida mujassamlashtirgan.

2.2§ Tajriba qurilmasining tuzilishi va ishlash prinsipi

DFS-52 spektrometrli lazerlar manbai yordamida yoritilgan suyuq kristall, polikristall moddalardan kombinatsion sochilish spektrini olish va qayd qilish uchun mo'ljallangan. Shuningdek bu spektrometr molekulyar spektroskopiya oblastida fizik-kimyoviy tekshirishlar, ya'ni suyuqliklar (loyqa) suv aralashmalari, kristallar, plyonkalar va bo'yoqlarining tarkibi hamda tuzilishini o'rganishda ishlatish mumkin [18].

Spektrometrning tarkibiga almashtiriluvchi difraksion panjaralari qo'shaloq monoxramator, qabul qiluvchi blok, yoritish qurilmasi chastotametr va hisoblash qurilmasiga ega bo'lgan elektron qayd qiluvchi qurilma. ERU-53 termoelektrik sovg'ichning blok pitaniyasi, alfavit-raqamli displey va yozuvchi qurilma (programmani tayyorlash sistemasi-15 IPG 32-003 ga kiruvchi). Laboratoriya o'zi yozuvchi asbobi LKS4-003, ulash kabellari va o'tkazgichlar komplekti, almashtirish va ehtiyot qismlari kiradi [18].

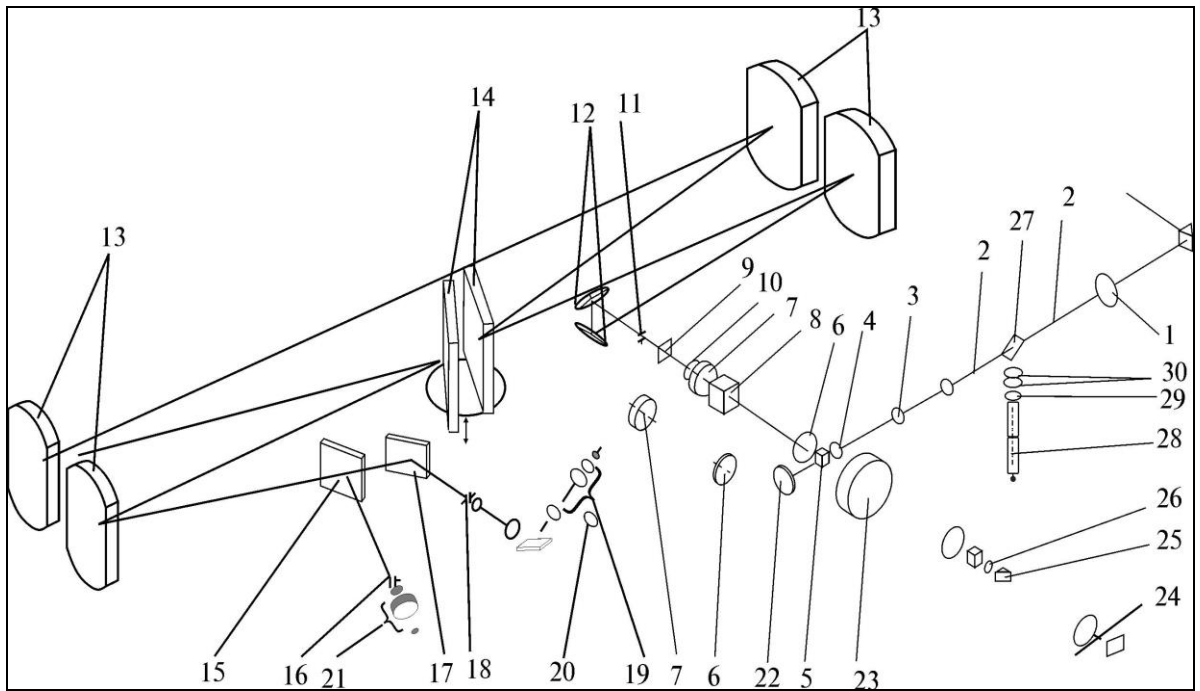
Tekshirilayotgan namunani monoxromatik yorug'lik bilan nurlantirilganda sochilgan yorug'likning spektrida qo'shimcha chiziqlar (kombinatsion sochilish chiziqlari) kuzatiladi. Bu chiziqlarni chastotalari namunaviy tushayotgan nur chastotasi bilan molekulaning xususiy chastotasining kombinatsiyasidan iborat bo'ladi. Kombinatsion sochilish spektrlarining intensivligi kichik bo'lib, ularni qayd qilish uchun yorug'likni kam sochuvchi monoxromatorlardan foydalanish zarur shuningdek shovqinni ham yetarlicha stabil bo'lgan qay qilishning sezgir sistemalaridan foydalanish kerak. DFS-52 spektrometrida uyg'otuvchi manba sifatida seriyli lazeri ishlatiladi.

Spektrni tekshirish uchun yorug'likning kam sochuvchi difraksion panjarali qo'shaloq monoxramatoridan foydalaniladi. Spektrni qayd qilish sovutib turiladigan fotoelektron ko'rsatkich yordamida amalga oshiriladi. Hisoblash qurilmasi spektrometrning ketma ketligiga va spektral diapazonining berilgan qismida signallarning ketma-ket qayd qilinishi, olingan natijalarning matematik qayta ishlanishini va natijalar qayd qiluvchi asbobga chiqarishni ta'minlaydi.

Spektrning optik sxemasi yoritish sistemasi, qo'shaloq monoxramator va qabul qiluvchi qurilma elementlaridan iborat 2- rasmda keltirilgan.

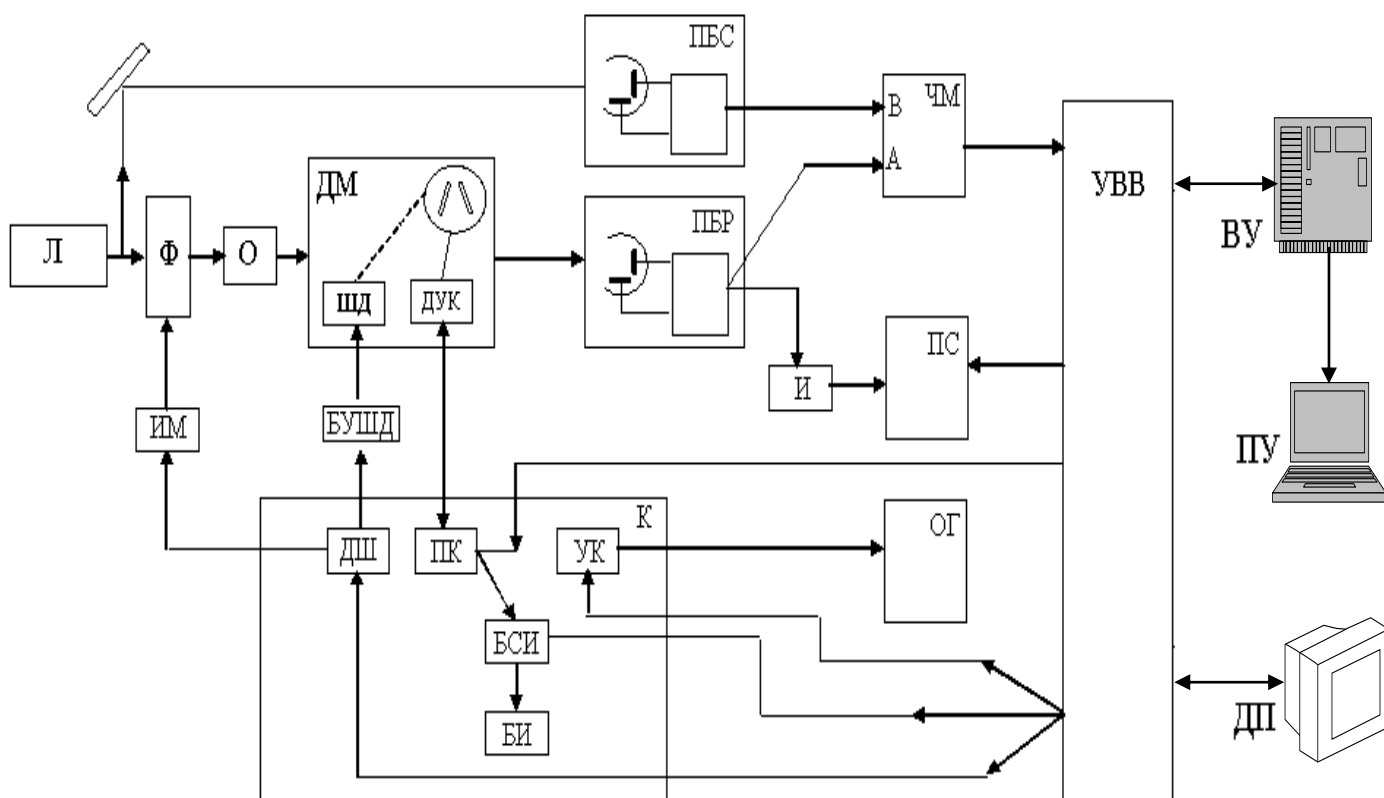
Yoritish sistemasi lazer nurining tekshirilayotgan namuna tekisligiga fokuslanishni ta'minlaydi, namunadan sochilgan nurlanishni yig'adi va uni qo'shaloq monoxramatorning kirish tirqishiga yo'naltiradi.

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



4-rasm. DFS-52 spektrometrining optik sxemasi

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



DFS-52 spektrometrining funksional sxemasi

Linza 6 bilan obyektiv 7 orasida parallel nurlar dastasiga prizma-analizator 8 qo'yilishi mumkin. Polyarizatsion tekshirishlar o'tkazganda monoxromatorning kirish tirqishi oldiga depolyarizatsiyalovchi klin 9 qo'yiladi. Yorug'lik filtri 10 spektrining 80 nm yuqori oblastida ishlaydi.

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

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

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

2.2. Kvanto-ximik hisoblashlar va ularning xatoliklari

Ushbu malakaviy bitiruv ishida olidimizga quyilgan maqsad, prapiloviy spirt va uning turli hil eritmalarida molekulalarning o'zaro ta'sirini kvanto-ximik hisoblashlar o'rganishdan iborat. 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 qo'llanilgan hisoblashlar Gaussian 98W dasturi yordamida Xartri-Fok usulida amalga oshirildi [17].

Benzol molekulasining monomer va dimer molekulsining optimizatsiyalangan ko'rinishlari uchun kvanto-ximik hisoblashlar Xartri-Fok usulida 6-31G(d) Gauss funksiyalari yordamida amalga oshirildi. Energiyalari bo'yicha optimizatsiya tekshirilayotgan obyekt uchun butun ichki koordinatalar bo'yicha amalga oshirildi. Normal tebranishlar chastotalari umumiy energiyadan ikkinchi darajali hosila olish yordamida hisoblandi.

Molekula murakkab kvant sistema bo'lib, u molekuladagi elektronlarning harakatini, atomlarining tebranma va molekulaning aylanma harakatini hisobga oluvchi Shredinger tenglamasi bilan ifodalanadi. Bu tenglamani yechimi juda murakkab bo'lgani uchun odatda uni elektron va yadrolar uchun alohida yechiladi. Molekulaning energiyasini o'zgarishi asosan uni tashqi qobig'idagi elektronlarning holatini o'zgarishi bilan bog'liqdir. Lekin molekuladagi elektronlarning ma'lum bir turg'un holatida ham molekula yadrolari umumiy inersiya markazi atrofida tebranma va aylanma harakat qilishi mumkin. Molekulaning energiyasi asosan uch harakatga mos energiyalarning yig'indisiga teng:

$$E \approx E_{el} + E_{teb} + E_{ayl}$$

bunda E_{el} - elektronlarining yadroga nisbatan harakat energiyasi; E_{teb} - yadroning tebranma harakat energiyasi; E_{ayl} - yadroning aylanma harakat energiyasi bo'lib, u molekulaning fazodagi vaziyatini davriy ravishda o'zgarishiga bog'liq bo'lgan energiya. Tajribadan aniqlanishicha $E_{el} = 1 \div 10$ eV, $E_{teb} \approx 10^{-2} \div 10^{-1}$ eV; $E_{ayl} \approx 10^{-5} \div 10^{-3}$ eV ga teng. Ya'ni $E_{el} \gg E_{teb} \gg E_{ayl}$ tengsizlik o'rinli bo'ladi. Bu energiyalar o'zaro quyidagi nisbatda taqsimlangan:

$$E_{el} : E_{teb} : E_{ayl} = 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M},$$

bu yerda m - elektron massasi, M - molekuladagi yadro massasi, $m/M = 10^{-5} \div 10^{-3}$.

Molekulaning chiziqli o'lchami valent elektronlarning harakat amplitudasi tartibidagi kattalik bo'lib, odatda $a \approx 10^{-8}$ sm. Bundan elektronlar harakati bilan bog'liq bo'lgan molekulaning elektron energiyasi E_{el} ham atom energiyasi tartibidagi kattalik ekanligi kelib chiqadi. Molekulalarning tuzilishi va ularning energiya sathlarining xususiyatlari kvant o'tishlarda sochilgan nurlanish (yutilish) spektrida, ya'ni molekula spektrida nomoyon bo'ladi. Molekulaning nurlanish spektri kvant mexanikasidagi tanlash qoidasiga mos holda (masalan, aylanma yoki tebranma harakatga mos kvant sonining o'zgarishi - ± 1 ga teng bo'lishi kerak) energetik sathlar tarkibi bilan aniqlanadi.

Shunday qilib, sathlar orasidagi turli xil o'tishlardan turli xil spektrlar hosil bo'ladi. Molekulaning spektral chizig'i chastotasi bir elektron sathdan boshqasiga

o'tishga mos keluvchi (elektron spektrlarga) yoki biror tebranma harakatga mos kelgan energetik sathdan ikkinchisiga o'tishga mos kelishi mumkin. Molekulalar spektri ham chiziqli bo'lib, ular spektrning UB, IQ va ko'zga ko'rinuvchi sohasida joylashishi mumkin. Aylanma sathlar bir-biriga juda yaqin joylashgani uchun ularga mos keluvchi spektral chiziqlar ham bir-biriga juda yaqin bo'lib, ular hatto tutashib ketadi.

Shuning uchun ajrata olish qobiliyati o'rtacha bo'lgan spektral optik asboblarda bu chiziqlar tutashib ketgandek, yo'l-yo'l bo'lib ko'rinadi. Lekin ajrata olish qobiliyati katta bo'lgan optik asboblarda ularni bir-biriga juda yaqin joylashgan, alohida chiziqlardan iborat ekanini ko'rish mumkin va bu yo'llarning kichik chastotalar tomonidagi chegarasi keskin, chastotaning katta qiymatlari tomonidagi chegarasi esa susayishgan ekanini ko'rish mumkin. Molekuladagi atomlar soni ortishi bilan molekula spektri murakkablashib, faqat keng yo'llar ko'rinish boshlaydi. Molekulalarning aylanma va tebranma energetik sathlarini modda faqat gaz holatda bo'lganda o'rganish mumkin. Moddaning suyuq va qattiq holatida molekulalarning o'zaro ta'siri tufayli ularning tebranma va aylanma energetik sathlarini o'rganish qiyinlashadi.

Ushbu magistrlik ishida olidimizga qo'yilgan maqsad, tajribada olingan natijalarini nazariy hisoblashlar bilan taqqoslash va yanada to'ldirishdan iborat edi. Bu hisoblashlar tajribada olingan natijalarni yanada to'ldirish bilan birga, tajriba natijalarini tahlil qilishni ham osonlashtiradi.

Bizning ishimizda qullanilgan hisoblashlar Gaussian 98W dasturida Xartri-Fok yaqinlashishida 6-31G++(d,p) to'plami negizida amalga oshirildi [17]. Nazariy hisoblashlar natijalarida quyidagi tartibda xatoliklarni hisobga olish talab etiladi [17]:

- bog'lanish uzunliklari 0,01 - 0,02 Å gacha aniqlikda hisoblanadi.;
- valent burchaklar ~ 1 % gacha aniqlikda;
- Energiyalar 2 kkal/mol gacha aniqlikda hisoblanadi.
- Chastotalar uchun esa 10-12 % ga yuqori chiqadi, tajriba natijalari bilan taqqoslash uchun ko'paytuvchi $0,89 \pm 0,01$ ishlatiladi.

III BOB. Olingan natijalar va ularning tahlili

Bizga ma'lumki spirtlar va ularning suvli eritmaları murakkab sistemalar qatorida turadi, bu esa o'z navbatida toza suyuqliklarda molekulalararo H-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 anamal xossalarini, molekulalararo H-bog'lanish va tuzilishi xaqida hozirgi vaqtgacha ilmiy adabiyotlarda bahs yuritilmoqda.

Molekulalararo o'zaro ta'sir tabiatini o'rganish zamonaviy molekulyar fizikaning asosiy tushunchalaridan biridir. Moddalarning asosiy xususiyatlarini va fizik tabiatini o'rganishda molekulalararo ta'sir katta rol o'ynaydi. Molekulalararo o'zaro ta'sirlarning tabiati va mexanizmini o'rganish uchun turli xil optik usullar qo'llaniladi. Moddalarning xossalari uning qanday molekulalardan tuzilganligiga va bu molekulalar o'zaro qanday joylashganligiga bog'liq. Fizika, kimyo va biologiyadagi ko'pgina fundamental masalalarni hal qilishda moddadagi molekulalarning miqdorini, ularning tuzilishini va boshqa xossalarini keng temperatura, bosim va konsentrasiya intervalida hamda turli agregat holatlarda bilish talab etiladi.

Bog'lanishlar orasidagi qonuniyatlarni aniqlash, xarakterli va qat'iy agregatlarni ajratish suyuqliklarning molekulyar tuzilish mexanizmlarini o'rganishda muhim ahamiyat kasb etadi. Adbiyotlarda qo'yimolekulyar spirtlarning tuzilishi va xossalari to'g'risida ma'lumotlar juda ko'p keltirilgan [19-23]. Ushbu keltirilgan fikrlarga acoslangan holda biz ushbu bitiruv ishida molekula xossalari va ular orasidagi o'z'aro ta'sirlarni o'rganish uchun [propilen spirti](#) molekulasini tanlab oldik.

Suyuqliklarda molekulaning xossalari va bog'lanishlari to'g'risida yetarlicha ma'lumot beradigan spektroskopik usullardan biri kombinatsion sochilish spektrlarining o'rganish usulidir. Propilen spirti va uning turli erituvchilar bilan

ertimlarida olib borilgan tajriba natijalarining tahlili va noempirik kvantoximik hisoblashlar natijalari bilan taqqoslash bo'yicha ishlar keltirildi.

Spirtlar va ularning aralashmalarida, suvli eritmalarining oziq-ovqat va boshqa sanoat tarmoqlarida, organizmlarning hayot faoliyatida muhim o'rin egallaydi, shuning uchun ham suvli eritmalarining o'rganish masalasi hozirgi vaqtgacha dolzarbdir [24-25].

Molekyulalararo o'zaro ta'sirlar ichida vodorod bog'lanish alohida ahamiyatga ega. Bunday bog'lanish yo'naltirilgan o'zaro ta'sir bo'lib, bog'lanish energiyasi 2-3 kkal/mol dan 15-20 kkal/mol gacha bo'ladi. 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. Suv yaxshi erituvchi hisoblanadi. H- bog'lanish elektroni yetishmaydigan atom va yuqori zichlikga ega elektronli molekulalar orasida sodir bo'ladi. So'ngi tekshiruvlar ko'rsatdiki molekulalarning protono-donorli va protono-akseptrlil xususiyatli moddalar ro'yxati yangi ma'lumotlar bilan to'ldi. Ushbu ro'yxatda π -elektronlari praton akseptrlari hisoblanadi degan xulosa beradi. Masalan [26-27] da benzol molekulalar va metanol o'rtasida vodorod bog'lanish hosil bo'lishi va ftor benzolning molekulalari bilan komplekslar hosil qilgan. Ya'ni C-H...Y tipidagi H- komplekslarining hosil bo'lish haqidagi masala ko'rib chiqilgan [28-29].

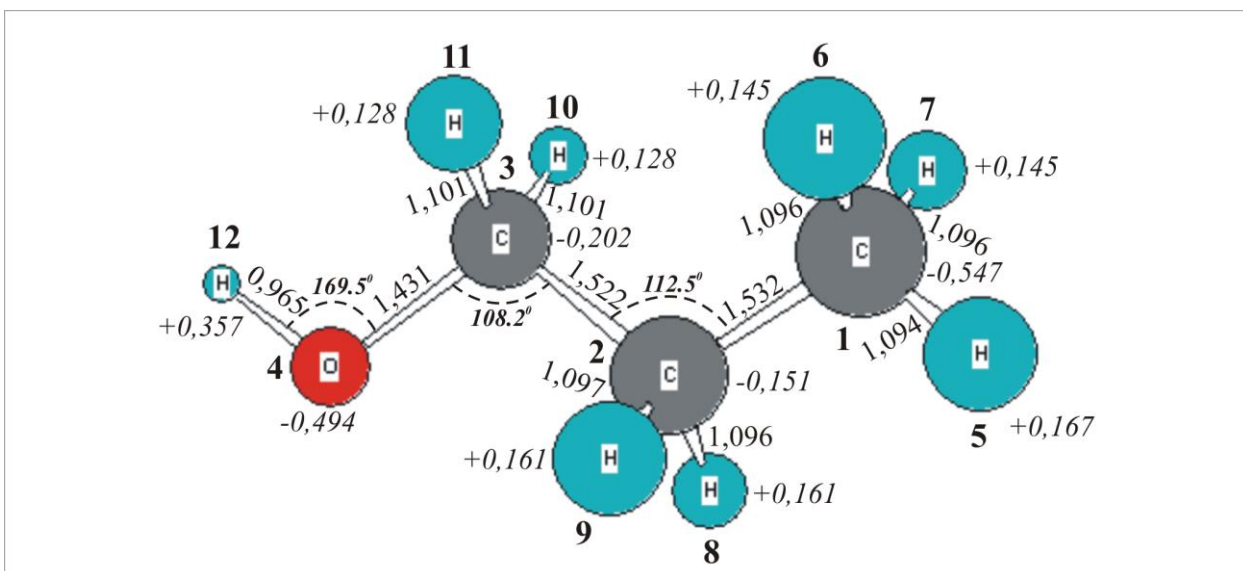
Molekyulalararo vodorod bog'lanishni o'rganishda molekulyar spektroskopiya muhim ro'l o'ynaydi. Vodorod bog'lanish hosil bo'lishi aynan spektroskopiyada o'rganiladi. Yani X-H...Y H- bog'lanish hosil bo'lishi X-H bog'lanishning zaiflashuviga olib keladi, Y atomning electron qatlami proton donori tomoniga siljiydi. X-H bog'lanishning zaiflashuvi X-H tebranish chastotasining kamayishi bilan tushuntiriladi, bu chiziq IQ spektrlarda o'zgaradi va KS spektrida quyi chastota tomoniga siljiydi va kengligi ortadi. Lekin

vaziyat juda murakkab chiqdi. Xloroform uchun vodorod bog'lanish hosil bo'lishi ba'zan C-H tebranish chizig'ining eng yuqori chastotalari tomonga siljishi bilan kuzatiladi [30]. Tajriba va hisoblashlar shuni ko'rsatdiki vodorod bog'lanish bo'lishi X-H tebranishning hususiyatlarini o'zgarishi bilan cheklanmaydi. Vodorod bog'lanish R_1 - X-H va Y- R_2 radikallarini tafsiflovchi kattaliklarni o'zgarishiga ham olib kelishi mumkin. Bu o'zgarishlar X-H o'zgarishlardek aniq spektral namoyon bo'lmaydi. Hisoblashlar ko'rsatdiki bir turdagi molekular orasidagi H- bog'lanish $2-10 \text{ sm}^{-1}$ to'lqin sonlarning farqi bilan chiziqlarning ajralishiga olib keladi. Turli molekularga tegishli tebranishlarning chastotasi o'zgaradi, yani depolerizatsiya koeffsenti o'zgaradi. Monomerli molekularning muvozanat holatida va chiziqlarning ham ajralishida bunday chiziqlarni joylashtirish, sochilgan yorug'likning turli izotrop va anizotrop tashkil etuvchilarini farqlab, chiziqlarning maksimumlari chastotasiga to'g'ri kelmaydi. [23] KS spektrlarida sochilgan yorug'likning turli polyarizatsiyasidagi X-H tebranish chizig'ining shakli farq qiladi, bu esa chiziqning murakkabligini anglatadi, chiziqlar farqi $60-70 \text{ sm}^{-1}$.

Bitiruv ishini bajarishda, A.Otaxo'jayev nomidagi muammolar laboratoriyasida olingan ma'lumotlardan foydalandik.

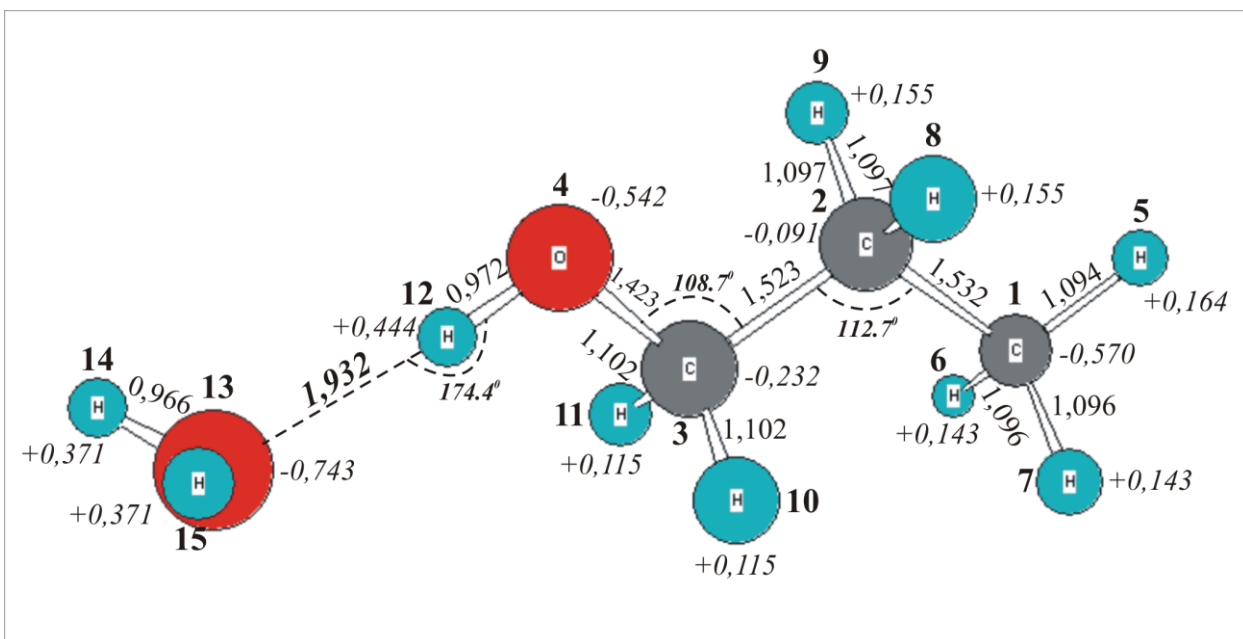
Kvatoximik-hisoblashlar B3LYP (DFT) gauss funksiyalar to'plami nerizida 6-31G⁺⁺(d,p) [17] amalga oshirilgan.

Kvanto-ximik hisoblashlar yordamida molekularning o'zaro orientasiyasi, bog' uzunliklari, tebranish chastotalari, zaryadlar taqsimoti, tebranish chastotalari, dimer hosil bo'lish energiyalari aniqlandi. Propilenning monomer molekulasini tuzilishi tabiati to'g'risidagi tassavurlar hisob kitob natijalari bilan mosligi aniqlandi. Propilen monomer molekulasining zaryadlar taqsimoti va bog' uzunliklari 1- rasmda keltirilgan.



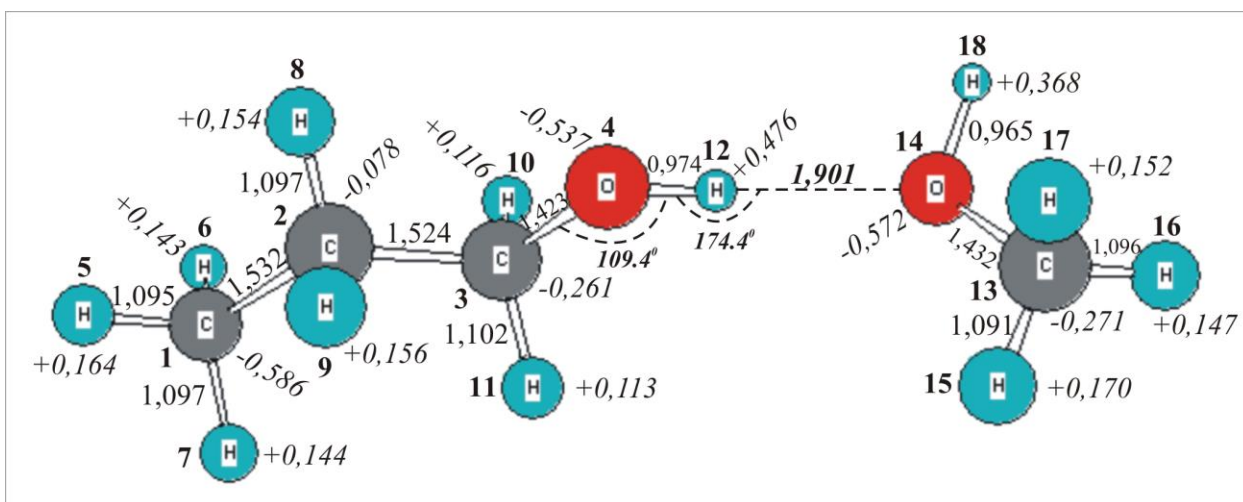
1-Rasm. Propilen monomer

Rasmdan ko'rinib turibdiki monomer molekuladagi H- atomlari zaryadlari H^{12} atomning zaryadi boshqa H-atamlari zaryadlaridan farq qilmoqda. Bundan ko'rinadiki H^{12} vadorod atomi molekulalararo vodorod bog'lanishda ishtirok etish ehtimolyati katta.



2-Rasm. Propilen+suv dimer

2-rasmda propilen spirt molekulasi bilan suv molekulasining o'zaro dimeri keltirilgan. Rasmdan ko'rinadiki propilen spirtining O-H guruhidagi H¹² atomi bilan suv molekulasining O¹³ -kislorod atomi o'rtasida vodorod bog'lanish hosil bo'ladi. Vodorod bog'lanish uzunligi 1,932 Å ni tashkil etadi. Bu erda vodorod bog'lanishda ishtirok etayotgan vodorod atomlarining zaryadi, bog' uzunliklari qolgan vodorod atomlarining zaryadidan bog' uzunliklaridan farq qiladi. Dimer hosil bo'lish energiyasi kkal/mol.



3-Rasm. Propilen + metil spirti dimeri

3-rasmda propilen molekulasi hamda metil spirti dimerili agregatsiyasi keltirilgan. Hisoblashlar shuni ko'rsatadiki, agregat hosil bo'lishida propilen molekulasi O-H guruhidagi H¹² -atomi bilan metil spirtining O-H guruhidagi O-atomi ortasida vodorod bog'lanish hosil bo'ladi. Vodorod bog'lanish uzunligi 1,901 Å ni tashkil etadi. Bu erda ham yuqorida takidlab o'tilganidek, vodorod bog'lanishda ishtirok etayotgan vodorod atomlarining zaryadi, bog' uzunliklari boshqa vodorod atomlarining zaryadidan, bog' uzunliklaridan farq qiladi. Bunday tipdagi agregatlarni hosil bo'lish energiyasi kkal/mol ni tashkil etadi.

Hisoblashlar orqali olingan natijalar asosida quyidagi fikrlarni aytish mumkin: propilen spirti toza holda murakkab ko'rinishga ega bo'lib, spektral chiziq kamida ikkita monomer hamda dimer agregatlarga tegishli bo'lgan molekulyar agregatlarga tegishli chiziqlardan iborat bo'lishligi bilan birga bu chiziqlar o'zaro bir-biriga juda yaqin bo'lganligidan bu chiziqlar bir-birini qoplashi

natijasida murakkam ko'rinishga ega bo'lishi mumkin va kombinasion sochilish spektrlarida shundau tarzda namayon bo'lishi mumkin. Propilen spirti suvda va metil spirti eritilganda spektral chiziqlarni yaqqol ikkita yoki undan ortiq chiziq'larga ajralganlini ko'rish imkoniyati paydo bo'lishi mumkin.

XULOSALAR:

1. Qo'yilgan maqsadga erishish uchun propilen molekulari uchun kvatximik-hisoblashlar B3LYP (DFT) yaqinlashishida 6-31G⁺⁺(d,p) funksiyalar to'plamida nerizida o'rganildi.
2. Propilen spirit, suv hamda metil spirti molekulari uchun nazariy hisoblashlar orqali molekularning o'zaro joylashishi, bog' uzunliklari, zaryadlar taqsimoti, tebranish chastotalari va kompleks hosil bo'lish energiyalari aniqlandi.
3. Propilen spirti hamda suv molekulari o'zaro molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilar ekan.
4. Propilen molekulari, metil spirti dimerli agregatsiya hosil bo'lishida hisoblashlar shuni ko'rsatadiki, agregat hosil bo'lishida propilen molekularining O-H guruhidagi H¹² -atomi bilan metil spirtining O-H guruhidagi O-atomi ortasida vodorod bog'lanish hosil qilishi aniqlandi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Шахпаронов М.И. Введение в современную теорию растворов. // М.; «Высш. школа», 1976. С.296.
2. Бахшиев М.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. // Изд. ЛГУ. 1974. С.182
3. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. “Высшая школа”. Москва 1984. С.156
4. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества, “Высшая школа”. Москва 1978. С.267
5. Н.Д. Соколов Водородная связь. “Наука” Москва 1989 йил.
6. Ғ.Муродов. “Атом ва молекуляр спектроскопия”. Самарканд 2004.СамДУ.120-123 бет.
7. Пиментал Дж., Мак-Клеллан О. Водородная связь. Москва: Мир. 1964. 462 с.
8. В.М.Велебров.”Водородная связь” Киев. Наукова Думка. 169 с.
9. Оралова Н.Д."Молекулярная спектроскопия" 1981.
10. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: 1970. 515 с.
11. Г.С. Ландсберг "Оптика" . Тошкент "Ўқитувчи"— 1981 йил.
12. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев “Теория строения молекул”.- Москва. ВШ. 1979. -359 с.
13. Денисов Г.С., Соколов Н.Д. Водородная связь. //Химическая энциклопедия. Москва: Сов.Энциклопедия, 1988. Т.1. С.403-404
14. Н.У.Usmonov, Н.Р. Rustamov, Н.Р. Rahimov Fizikaviy ximiya. “O’qituvchi” Toshkent 1974 yil.
15. A.Pople, M.Head-Gordon, D.J.Fox, K.Raghavachari and L.A.Curtiss, Gaussian-1 theory: A general procedure for prediction of molecular energies. //J. Chem. Phys. 1989. 90, p.5622.

16. R.Seeger and J. A. Pople, "Self-Consistent Molecular Orbital Methods. XVIII. Constraints and Stability in Hartree-Fock Theory"//J. Chem. Phys. 1977.66, p.2344.
17. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel Gaussian 98.- Gaussian. Inc. Pittsburgh PA, 1998 yil.
18. Texnicheskiy opticheskiye spektrometra DFS-52
19. J.W.Handgranf, T.S.Van Erp, E.J.Meijer, Chem. Phys. Lett., 367 (2003) 617.
- 20.L.Bianchi, O.N.Kalugin, A.K.Ahya, Mol. Simulation, 25 (2000) 321.
- 21.F.Huisken, M.Slemmer, J.Chem. Phys., 98 (1993) 7680
- 22.I.Doroshenko, O.Lizengevych, V.Pogorelov, L.Savransky, Ukr.J.Phys, 49 (2004). P540-544.
- 23.F.H.Tukhvatullin, A.Jumaboev, U.N.Tashkenbaev, A.Tursunkulov, A.Shaymanov, J.Raman Spectrosc. 29, 1027-1029, 1998.
- 24.Погорелов В.Е., Ходжиева Э, Химическая физика. 1993. Т.12. Вып. 7. С.1032-1035
- 25.Tanabe K., J. Raman Spectrosc. 15, 4 (1984).
- 26.Suzuki S., Green P.G., Bumgarner R.E., Dasgupta S., Goddard W.A., Blake G.A. Science (1992), 257, 942.
27. Pribble R.N., Garret A.W., Haber K., Zwier T.S. J. Chem. Phys. (1995), 103, 531.
- 28.Djafari S., Lembach G., Barth H.D., Brutschy B.Z. Phys. Chem. (1996), 195, 253
- 29.Djafari S., Barth H.D., Buchhold K., Brutschy B. J. Chem. Phys. (1997), 107, 10573.
- 30.Тухватуллин Ф.Х., Атаходжаев А.Қ., Жумабаев А., Ташкенбаев У.Н., Муродов Г. Журн. Прикл. спектр. Т. 56, № 6, (1991), С. 10.