

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY
VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

**FIZIKA FAKULTETI
“5140200 – FIZIKA” TA'LIM YO'NALISHI
“Optika” kafedrasи**

DAVRONOV MUHAMMADJON ZIYADULLO O'G'LI

**VODOROD BOG'LANISHLI KOMPLEKSLARDA TEBRANISH
POLOSASINING FORMASINI O'RGANISH**

**“5140200 – Fizika” ta'lism yo'naliishi bo'yicha bakalavr
darajasini olish uchun**

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

Ilmiy rahbar: dots. G'. Murodov

Bitiruv malakaviy ishi “Optika” kafedrasida bajarildi. Ish kafedraning 2018 yil _____ iyundagi majlisida muhokama qilindi va himoyaga tavsiya etildi (_____-bayonnomma).

Kafedra mudiri:_____ prof: A. Jumabaev

Bitiruv malakaviy ish YaDAK ning 2018 yil “____” _____dagi majlisida himoya qilindi va _____ball bilan baholandi (_____-bayonnomma).

YaDAK raisi:_____

A'zolari:_____

Samarqand – 2018

MUNDARIJA

KIRISH	3
I BOB. NAZARIY QISM	5
1.1 Molekulaning tuzilishi va xossalari	5
1.2 Molekulalararo o'zaro ta'sir, Van-der-Vaals kuchlari	10
1.3 Vodorod bog'lanish va uning tebranish spektrida namoyon bo'lishi	14
II BOB. AMALIY QISM	20
2.1 Tebranma aylanma polosalarning aylanma strukturasi va ikki atomli molekulalarning aylanma tebranma spektri	20
2.2 Molekulalarning tebranma harakati va ikki atomli molekulalarning tebranish energiyasi	29
III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI	35
3.1 Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrlari	35
3.2 CO+HCl va N ₂ +HCl komplekslarni kvanto-ximik hisoblash natijalari	40
XULOSA	44
FOYDALANGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI	45

KIRISH

Ishning dolzarbliji: Molekulalararo o'zaro ta'sir jumladan vodorod bog'lanish moddalarning har qanday agregat holatida ularning xossalari belgilab beradi. Molekulalararo o'zaro ta'sirning alohida turi hisoblangan H-bog'lanishni o'rganish uning spektroskopiyadagi ahamiyatidan tashqari kimyo, biologiya umuman tirik organizmning mavjudligida ham muhim rol o'yndaydi. Shuning uchun uning spektral namoyon bo'lishiga bag'ishlangan turli hajmdagi ilmiy ishlar yildan-yilga ko'payib bormoqda. Lekin ular vodorod bog'lanishning tabiatini to'liq ochib berishga yetarli emasligini guvohi bo'lamiz.

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqagan turlaridan biri vodorod bog'lanish ekan bu bog'lanish energiyasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sirning energiyasi atrofida va undan kuchliroq bo'lib, o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning spektral parametrlariga kuchliroq ta'sir qiladi. Boshqacha aytganda, molekulaning aylanma harakati ham, atomlarning bir-biriga nisbatan tebranma harakati ham o'zgaradi. Bundan tashqari molekulalarning elektr xossalari va dipol momenti ham o'zgaradi.

Ishning maqsadi: Bu ishdan ko'zlangan asosiy maqsad HCl ning azod va uglerod oksidi bilan aralashmalari misolida kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrini hamda olingan tajribalar asosida molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarini va ularning spektral parametrlarini o'rganish.

Ushbu maqsadga erishish uchun quyidagi vazifalar qo'yildi:

- Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrini o'rganish.
- CO+HCl va N₂ +HCl molekulasini IQ tebranish spektrini o'rganish va kvanto-ximik hisoblashlar orqali tekshirish.

Tadqiqot obyekti: CO va N₂ molekulalarning HCl molekulasi bilan hosil qilgan kompleksining IQ tebranish spektrlarini tahlil qilish.

Suyuqliklarning va gazlarning amaliyotda keng qo'llanilishi va ularning kimyo, biologiya va fizikaning bir qancha sohalarida ishlatalishi sababli suyuq va gaz, muhitning tuzilishi va xossalari bilishga bo'lgan talab

kuchayib bormoqda, buning natijasida esa suyuqliklar va gazlar nazariyasini yanada rivojlantirish talab qilinmoqda.

Tadqiqot usuli: Yorug'likning IQ yutilish spektrlari yordamida vodorod bog'lanishli komplekslarni $HCl + CO$ va $HCl+N_2$ misolida o'rganish va olingan natijalarini kvanto-ximik hisoblashlar bilan taqqoslash.

Tadqiqot ishining amaliy ahamiyati: Malakaviy bitiruv ishida tadqiqotlar ham fundamental ham amaliy xarakterga ega, optika va molekulyar fizikaning muammoli masalalarini yechishga qaratilgan, ya'ni - moddaning suyuq va gaz holatida molekulalar agregasiyasi masalalasini yechish, moddaning makroskopik xossalarini aniqlashda agregasiyalar o'rnini aniqlash, molekulalararo vodorod bog'lanish muammolarini o'rganish uchun molekulyar spektroskopiya usullarini rivojlantirish. Bu tadqiqotlar va boshqa mualliflarning shunga o'xshash tadqiqotlari moddaning suyuq va gaz holati molekulyar nazariyasini rivojlantirishga imkoniyat yaratadi. Bu o'z navbatida suyuq va gaz muhitlarning nazaryasini ishlab chiqarishdagi kamchiliklarni bartaraf etish uchun maqsadli ishlatishga olib keladi. Molekulalararo vodorod bog'lanishning tirik organizmlar hayoti va faoliyatidagi o'rnini hisobga olganda, bunday tadqiqotlar tirik organizmlar faoliyati jarayonida molekulyar agregasiyalar molekulalararo va ichki molekulyar vodorod bog'lanish rolini chuqurroq tushunishiga olib keladi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati. Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarni Van-der-Vaals kuchlaridan farqli ravishda ma'lum bir qonuniyatga bo'y sunishini tadqiq qilish qator kimyoviy masalalarni yechishda muhim amaliy ahamiyatga ega.

Bitiruv ishining tuzilishi va hajmi. Ish kirish, 3 ta bob, xulosa va 40 nomdag'i foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat bo'lib, 45 sahifada bayon qilingan. Ishda 18 rasm mavjud.

I BOB. NAZARIY QISM

1.1 Molekulaning tuzilishi va xossalari

Molekulalarning tuzilish nazariyasini o'tgan asrning o'rtalarida A. M. Butlerov yaratdi. Bu nazariyaga muvofiq, molekulalarning xossalari uning tarkibiga kirgan atomlarning tabiatini va sonidan tashqari, ular orasidagi bog'lanish xarakteriga va ularning fazada bir-biriga nisbatan joylashishga ham bog'liq. Kvant mexanikasiga asoslanib, atomlar orasidagi bog'lanishning tabiatini, atomlarning bir-biriga bevosita ta'sir qilishini va fazada qanday joylashuvini aniqlashga muvaffaq bo'linadi.

Ma'lumki, molekula barqaror sistemadir. Molekuladagi atomlarni bir-biridan ajratish uchun ma'lum energiya sarf qilish kerak bo'ladi. Bu esa molekuladagi atomlarning biror kuch bilan bir-biriga tortishib turganligini ko'rsatadi. Atomlar orasida ularni bir-biriga tortib turadigan bog'lar bor. Atomlar orasidagi bunday bog'lar kimyoviy kuchlarning, ya'ni valent kuchlarning ta'sir qilishini natijasida vujudga keladi.

Atomlar orasidagi valent bog'lanishning elektr tabiatli ekanligini 1908-yilda V. Ya. Kurbatov ta'riflab bergen edi.

Kimyoviy reaksiyalarda elektronlarning gruppalanish xarakteriga qarab, elektron nazariyasi asosida, bir qancha bog' borligi aniqlanadi. Qanday bog'lanish vujudga kelishiga elementlarning elektromanfiylici (oddiy hollarda) katta ta'sir ko'rsatadi. Quyida biz ba'zi bog'lanishlarn ko'rib o'tamiz.

Ion bog'lanish (yoki elektrovalent bog'lanish). Ion bog'lanish nazariyasini 1916-yilda Kossel ta'riflangan.

Ion bog'lanish elektromanfiylik jihatidan bir-biridan katta farq qilgan ikki element orasida vujudga keladi. Demak, ion bog'lanish birinchi gruppaga elementlari (ishqoriy metallar) bilan yettinchi gruppaga elementlari (galoidlar) orasida vujudga keladi. Eng tipik ion bog'lanish LiF birikmasida bo'ladi. Ion bog'lanishning vujudga kelishini NaCl misolida ko'rib chiqaylik. Xlor atomi natriy atomiga qaraganda anchagini elektromanfiydir, shu sababli ular bir-biriga ma'lum masofagacha yaqinashganda natriy atomi o'zining sirtqi qavatidagi bir elektronini xlorga beradi, xlor esa bu

elektronni biriktirib oladi. Natijada natriy atomi musbat zaryadlangan ion (anion) Cl^- ga aylanadi (ionlar quyidagicha yoziladi, masalan, musbat ikki valentli temir ioni: Fe^{++} , Fe^{2+} tarzda, sulfat kislotasining manfiy ikki valentli qoldig'i: SO_4^{2-} , SO_4^{2-} yoki SO_4^{2--} tarzida yoziladi). Hosil bo'lgan bu ionlar bir-birini kulon kuchi bilan tortib turadi, natijada NaCl birikmasi hosil bo'ladi. Shunday qilib, ion bog'lanishli molekula qarama-qarshi elektr bilan zaryadlangan qismlardan iborat bo'ladi.

Elektron berish va elektron biriktirib olish natijasida, reaksiyaga kirishuvchi atomlarning sirtqi qavatidagi elektronlarlar soni 8 yoki 2 ga teng bo'lib qoladi. Yuqorida aytib o'tilganidek, (8 geliyda 2) elektronidan iborat qavat barqaror qavatdir. Shunday qilib, ion bog'lanishning hosil bo'lishi natijasida atomlar barqaror holatda o'tadi.

Masalan, natriy atomida $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ elektronlar bor. Natriy atomi sirtqi qavatidagi 3s elektronini bersa, sirtqi qavatida 8 elektron, ya'ni $2s^2 2p^6$ elektronlar qoladi. Xlor atomida $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ elektronlar bor. Demak, uning sirtqi qavatida 7 elektron ($3s^2 3p^5$ elektronlar) bor. Xlor atomi natriy atomi bergen elektronni biriktirib olganda, uning sirtqi qavatida elektronlarning soni 8 ga yetadi. Demak, natriy barqaror holatga o'tishi uchun bir elektronni biriktirib olishi kerak. Xuddi shuningdek, ikkinchi gruppadagi Mg, Ca va boshqa elementlarning atomlari ikki elektron berib, ikki valentli ion Mg^{2+} , Ca^{2+} ,ga aylanganda, uchinchi gruppadagi Al uch elektronni berib, Al^{3+} ga aylanganda barqaror holatga o'tadi.

Shunday qilib, ion bog'lanish sodir bo'lishida beriladigan yoki biriktirib olinadigan elektronlar soni atomning barqaror holatiga kelishi uchun zarur bo'lgan elektronlar soni bilan belgilanadi.

Biror element atomining elektronlar berishi yoki biriktirib olishi va bu elektronlar soni shu elementning o'zigagina emas, balki uning qaysi element bilan birikayotganida ham bog'liqdir.

Masalan, vodorodning elektromanfiyligi o'rtacha. U o'zidan ko'ra elektromanfiyroq elementlar bilan biriktirib, musbat valentligi va elektromusbatroq elementlar bilan birikib, manfiy valentli bo'lishi mumkin. U ftor, xlor, kislород singari kuchli elektromanfiy elementlar bilan birikkanda o'z elektronni berib,

musbat bir valentli va aksincha, metallar bilan birikkanda elektron biriktirib olib, manfiy bir valentli bo'ladi.

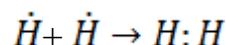
Ma'lumki, eng yuqori musbat valentlik bilan manfiy valentlikning yig'indisi doimo 8 ga teng bo'ladi. Buning sababi yuqorida bayon etilganlardan ma'lum. Atom o'zining sirtqi qavatidagi elektronlari sonini 8 ga etkazishi yoki shu qavatdagi elektronlarini berib, boshqa elementning sirtqi qavatidagi elektronlar sonini 8 ga etkazishi mumkin. Har qaysi elementda berilgan va biriktirib olingan elektronlar yig'indisi 8 ga teng bo'ladi.

Shuni ham aytib o'tish kerakki, geteropolyar birikmalar hamma agregat holatda ionlik xarakterini saqlab qoladi. Masalan, NaCl birikmasi gaz, suyuqlik va qattiq, holatlarning hammasida ham natriy va xlor ionlaridan tarkib topgan va ular orasida ion bog'lanishi mavjud bo'ladi.

Kovalent bog'lanish. Elementlarning elektromanfiyligi bir-biriga teng bo'lganda kovalent bog'lanish vujudga keladi. Shunday bog'lanish H₂, O₂, N₂ singari molekulalarda mavjuddir. Kovalent bog'lanishni 1916- yilda Lyuis kashf etgan.

O'zaro ta'sir qiluvchi atomlar sirtqi qavatdagi elektronlarining bir qismini (yoki hammasini) bog' hosil qilishga beradi va natijada, elektronlar jufti hosil bo'ladi. Elektronlar jufti (juftlari) ikkala atomga qarashli bo'ladi va ikkala atomning atrofida aylanadi. Ma'lum vaqtida ikkala atom yadrosi o'rtasida bo'lib, ikkala atom yadrosiga bir vaqtida tortiladi va natijada, ikkala yadro atomni bir sistema qilib bog'laydi.

Vodorod molekulasining hosil bo'lishi. Bunda har qaysi vodorod atomi o'z elektronini bog' hosil qilishga beradi. Shunday qilib, elektron jufti hosil bo'ladi. Bu juft ikkala atomga ham taalluqli bo'ladi:



Shunday qilib, har qaysi vodorod atomi yadrosining atrofida 2 elektron, har qaysi xlor atomining yadrosi atrofida 8 elektron aylanadi. Demak, atomlarning sirtqi qavatida, inert gazlar atomlarining sirtqi qavatidagi singari, mustahkam elektronlar konfiguratsiyasi (2 yoki 8 elektron) bo'lib, bu atomlar barqaror holatga keladi.

Parallel elektronlar har qanday masofada bir-birini itaradi, antiparallel elektronlar esa ma'lum masofada bir-birini tortiladi. Shu sababli elektronlar juftini antiparallel elektronlargina hosil qiladi.

Qutbli (polyar) bog'lanish. Bunday bog'lanish elementlarning elektromanfiyligi bir-biridan ion bog'lanish hosil qilishga olib keladigan darajada farq qilmay, faqat ozgina farq qilganda vujudga keladi. Qutbli bog'lanish o'z tabiatini va hosil bo'lish mexanizmi jihatidan kovalent bog'lanishdan farq qilmaydi. Qutbli bog'lanishda elektronlar jufti, kovalent bog'lanishdagidek, ikki yadroning o'rtaida bo'lmay, elektromanfiy element tomon bir oz siljigan bo'ladi. Bu bog'lanish, odatda, quyidagicha ifodalanadi:



—> alomati elektronlar juftining qaysi atomga tomon siljiganligini ko'rsatadi.

Elektronlar juftining bir tomonga siljishi natijasida molekulaning bir tomoni ortiqcha musbat va bir tomoni ortiqcha manfiy zaryadlanadi. Musbat zaryadning og'irlik markazi manfiy zaryadning og'irlik markazidan ma'lum masofada bo'ladi. Bir molekulada ikkita qutb vujudga keladi. Shunday qilib, dipol hosil bo'ladi. Miqdoriy jihatdan baravar va bir-biriga nisbatan ma'lum masofada joylashgan, qarama-qarshi elektr zaryadlaridan iborat sistema dipol (ikki maydonli) deb ataladi. Dipol uzunligi (ikki qutb markazi oraliqi) h ning elektron zaryadi e ga ko'paytmasi dipol momenti deyiladi va μ harfi bilan belgilanadi:

$$\mu = eh$$

Odatda, dipollarning qiymati 10^{-8} elektrostatik birlik chamasida bo'ladi. Bunday kichik son bilan ish ko'rish noqulay, shu sababli 10^{-8} e. s. b. birlik qilib olingan va debay (D) deb atalgan.

Dipol momentining qiymati qutbli bog'lanish qanchalik qutblanganligini ko'rsatadi. Masalan:

H_2O	HCl	HJ
$\mu=1.84\text{D}$	$\mu=1.03\text{D}$	$\mu=0.38\text{D}$

Agar molekulada bitta qutbli bog'lanish bo'lsa, molekulaning dipol momenti shu bitta bog'lanishning dipol momentiga teng. Molekulada qutblangan bir qancha

bog'lanish bo'lsa, molekulaning dipol momenti bu bog'lanishlar dipol momentlarining yig'indisiga teng. Dipol momenti vektor kattalik bo'lidanligidagi, ular parallelogramm qoidasi asosida qo'shiladi. Masalan, CO₂, CS₂ birikmalarda har qaysi bog'lanish qutblangan bo'lib, bu bog'lanishlar bir-biriga nisbatan bir chiziqda (180°) joylashgan. Shu sababli umumiy dipol nolga tengdir. Suvda H – O bog'lanish qutblangan. Suv molekulasida atomlar bir-biriga nisbatan joylashgan.

Suv molekulasining dipol momenti 1,84 D ga teng.

Dipol momenti noldan katta bo'lidan molekulalar qutblangan (polyar) molekulalar deb, dipol momenti nolga teng bo'lidan molekulalar esa qutblanmagan (polyarmas) molekulalar deb ataladi.

Qutblangan molekula + – ishorasi bilan, qutblanmagan molekula ± ishorasi bilan ko'rsatiladi. Molekulalarning tuzilishi jihatidan ega bo'lidan dipoli tug'ma dipol deyiladi.

Suv, spirt, vodorod galogenidlar qutblangan molekulalardir. Demak, ularning tug'ma dipoli bor. Benzol, uglevodorodlar qutblanmagan molekulalardir.

Koordinatsion bog'lanish. Bunday bog'lanish, ko'pincha, kompleks birikmalarda uchraydi. Bu bog'lanish o'z tabiatini jihatidan kovalent bog'lanish bo'lib, undan faqat hosil bo'lish mexanizmi jihatidan farq qiladi. Kovalent bog'lanishda elektronlar jufti ikkala atomning elektronlaridan hosil bo'ladi. Koordinatsion bog'lanish hosil bo'lishida faqat bir atomning elektronlarigina ishtirok etadi. Bog'lanish hosil qiluvchi elektronlar juftini bir atom (yoki atomlar gruppasi) beradi. O'z elektronlarini bog'lanishga bergan. Ko'pincha, bu bog'lanish koordinatsion bog'lanish deb ataladi. .

Odatda, «erkin» elektronlar jufti bor atom yoki ion donor bo'ladi. Aksincha, elektron qavatlari elektron bilan to'limgan va elektron biriktirib olishi mumkin, bo'lidan atom va ion akseptor bo'ladi. So'nggi vaqtarda kovalent bog'lanishning yangi xillari topildi. Ikki atom bir-biriga faqat bir juft elektron bilan bir qatorda, yakka elektron va uch elektron orqali ham tortilishi mumkin.

1.2 Molekulalararo o'zaro ta'sir, Van-der-Vaals kuchlari

Gaz tabiatining yuqori bosimlarga xos hususiyatlari va gaz-suyuqlik fazaviy o'tishlari Klapeyron tenglamasi bilan bayon qilinmaydi, chunki bu tenglananing kichik bosimdagi gazlar (ideal gazlar) uchungina o'rinni ekanini bilamiz. Biroq bu tenglamani shunday mukammallashtirish mumkinki, bunda u real gazlarning istalgan bosimlardagi hossalarini to'gri tasvirlabgina qolmasdan ma'lum aniqlikda suyuqliklarning hossalarini va gazsimon holatdan suyuqlik holatiga fazali o'tishni ham tavsiflashi mumkin.

Buning uchun gaz molekulalari o'lchamsiz moddiy nuqtalardir va molekulalar orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari mayjud emas, deb qilgan farazlarimizdan voz kechishimiz kerak. Agar aslida molekulalar orasidagi kuchlar mavjud va molekulalarning ma'lum o'lchamlari bor deb qabul qilsak, u holda Klapeyron tenglamasiga tegishli tuzatmalar kiritib, tajriba ma'lumotlari bilan yaxshiroq muvofiq keladigan real gazlar holatining yangi tenglamasini hosil qilishga umid qilsa bo'ladi.

Holat tenglamasining molekulalarning chekli o'lchamlari ham, molekulalar orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari ham nazarga olingan holda mukammallashtirilgan ko'rinishni 1-marta 1873-yilda Van-der-Vaals tavsiya qilgan edi. Shuning uchun tenglama uning nomi bilan ataladi. Shuni ham qayd qilish kerakki, biz o'rganishga kirishmoqchi bo'lgan real gazlar holati tenglamasi ham taxminiy tenglamadir, chunki molekulalar orasidagi ta'sir qiladigan kuchlarni aniq hisoblash usullari yo'q. Molekulalar orasidagi itarishish kuchlarini hisobga olish. 1 mol uchun yozilgan ideal gaz holatining

$$pV = RT \quad (1)$$

tenglamasida V hajm gaz to'ldirilgan idishning hajmini bildiradi. Ayni vaqtida bu hajm ana shu hajmda harakatlanayotgan gaz molekulalarining har biri uchun mumkin bo'lgan hajm hamdir. Gap ideal gaz haqida borayotgan bo'lsa, "idishning hajmi" bilan "har bir molekulaning harakatlanishi mumkin bo'lgan hajm" orasida farq yo'q, chunki molekula nuqtalar harakatlanishda bir-biriga halal bermaydi. Aslida esa gazda idishning butun hajmi molekulalar ixtiyorida

emas, chunki har bir molekula hajmining biror qismini egallaydi va u egallagan hajm qolgan barcha molekulalarning harakatlanishi mumkin bo'lgan hajm bo'la olmaydi.

Bu holni hisobga olish uchun idish hajmidan uning molekulalar harakatlanishi mumkin bo'lmasan qismini ayirib tashlash kerak. Bu hajmning bu qismini **b** bilan belgilaylik, u holda (1) tenglama shunday ko'rinishga keladi:

$$p(V - b) = RT \quad (2)$$

Shunday qilib kiritilgan **b** tuzatma gazni cheksiz katta bosim bilan siqilganda uning egallashi mumkin bo'lgan chegaraviy hajmini bildiradi.

Van-der-Vaals tenglamasining ahamiyatni faqatgina moddaning bo'lishi mumkin bo'lgan ikki fazasi suroq va gazsimon fazasi mavjudligini tavsiflash bilan cheklanmaydi.

Molekulalarning o'zaro tortishish potensialini

$$E_n = -\frac{a_1}{r^m}$$

Itarish potensialini,

$$E_n = \frac{a_2}{r^m}$$

deb belgilasak molekulalararo ta'sir potensialining umumiyo ko'rinishi

$$E_n = -\frac{a_1}{r^m} + \frac{a_2}{r^n} = \frac{a_2}{r^n} - \frac{a_1}{r^m} \quad (3)$$

bilan ifodalananadi, bu yerda a_1, a_2, m, n lar berilgan molekulyar sistema uchun doimiy kattalikdir.

Ko'p hollarda molekulalararo ta'sirni ifodalaydigan ta'sir potensialining maxsus ko'rinishidan foydalilaniladi. Amalda keng qo'llaniladigan potensiallaridan biri Lennard-Jons potensialidir.

$$E_n(r) = 4\varepsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (4)$$

Molekulalararo ta'sir potensialining molekulalari orasidagi masofaga bog'liq ravishda o'zgarishi grafik ravishda keltirilgan. Xozirgi vaqtida bundan tashqari potensiallar ham mavjud.

Molekulalarda atomlar orasida kimyoviy kuchlar ta'sir qiladi. Bu kuchlar elektrostatik tabiatga ega bo'lib, atomlarning elektron strukturasiga bog'liq bo'ladi. Molekulalar orasidagi ta'sir kuchini odatda Van-der-Vaals ta'sir kuchi deyiladi. Bu kuch molekulalar orasidagi masofa kamayishi bilan ularni biriktiradi, gazni suyuqlikka aylantiradi, absorbsiyaga sabab bo'ladi va hokazo. Bunday ta'sirga quyidagilar kiradi:

1. Oriyentatsion ta'sir
2. Induksion ta'sir
3. Dispersion ta'sir

Oriyentatsion ta'sir energiyasi quyidagiga teng:

$$U_{or} = \frac{2P_1P_2}{r^3} \quad (5)$$

P_1 P_2 -molekulalarning dipol momentlari, r – ular orasidagi masofa. Bunday ta'sir asosan qutbli molekulalar ya'ni dipol momentiga ega bo'lgan molekulalar orasida bo'ladi. Bunda bir molekula tomonidan hosil qiladigan elektr maydonida ikkinchi molekula oriyentirylanadi.

Molekulaning issiqlik harakati ularning o'zaro oriyentatsion ta'siriga qarshilik ko'rsatadi. Demak, oriyentatsion ta'sirni hamda molekulalarning issiqlik harakatini hisobga olsak oriyentatsion ta'sir energiyasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$U_{or} = \frac{2}{3kT} \frac{P_1P_2}{r^6} \quad (6)$$

Ifodadan ko'rinaradiki, oriyentatsion ta'sir energiyasi temperaturaga bog'liq, agar temperatura oshsa, bu energiyaning qiymati kamayadi.

Induksion ta'sir. Bu holda ham bir dipol qo'shni molekula o'z yo'naliishiga mos bo'lgan dipolni induksiyalaydi, ya'ni qutbli o'zaro ta'sirlanganda qutbli molekulaning elektr maydoni qutbsiz molekula atrofida yo'nalgan dipol momentini induksiyalaydi. Induksiyalovchi molekulani induksion

qutblanuvchanligi qancha katta bo'lsa, induksiyalangan moment ham shuncha katta bo'ladi. Induksion ta'sir energiyasini quyidagicha ifodalash mumkin:

$$U_{ind} = -2\lambda_{ind} \frac{P^2}{r^6} \quad (7)$$

Ko'rinib turibdiki, induksion o'zaro ta'sirda o'zaro ta'sir energiyasi zarrachalar orasidagi masofaning oltinchi darajasiga teskari proporsional ekan. Orientatsion ta'sirga esa bu energiya masofaning uchinchi darajasiga bog'liq.

Dispersion ta'sir. Doimiy dipol momentiga ega bo'limgan molekulalar orasida dispersion ta'sir mavjud bo'ladi. Ya'ni qutbsiz molekulalar orasida bo'ladigan o'zaro ta'sir bu holda molekula atomini muvozanat vaziyatdan siljishi natijasida dipol momenti vujudga keladi bu ta'sirning bo'lishiga molekulaning nolinch enerjiyasiga ega bo'lishi sababdir. Bu holda atom elektronni bir muvozanat vaziyatdan tebranib turib garmonik tebranish hosil qiluvchi zarracha deb qarash qabul qilingan. Ana shunday zarracha ossilyator deyiladi.

Atomni dipol momenti nolga teng, lekin elektronni tebranishi tufayli ossilyatorni dipol momentini o'rganish noldan farqli deb qarash mumkin. Demak, ossilyatorning o'zaro ta'sir energiyasini quidagicha yozish mumkin:

r-ossilyator orasidagi masofa

$$U_{dis} = \frac{2e^2 x_1 x_2}{r^3} \quad (8)$$

e-elektronning zaryadi, x_1, x_2 ta elektronni muvozanat holatdan chetlanganligi siljish masofasi.

Dispersion ta'sir energiyasi quyidagicha bo'ladi:

$$U_{dis} = \frac{h}{4\pi} \frac{a^2 \omega}{r^6} = \frac{a^2}{r^6} \frac{h\nu}{2} \quad (9)$$

Shunday qilib zarrachalarning o'zaro tortishishining sababli nolinch enerjiyasining pasayishi ekan. Umumiy holda P dipol momenti va qutblanuvchanlikka ega bo'lgan ta'sir energiyasi:

$$U = U_0 + U_d = \left\{ \frac{2}{3} P_0 + 2\delta P_0^2 + \frac{3}{4} I\delta^2 \right\} \frac{1}{6} n. \quad (10)$$

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

Molekulalararo o'zaro ta'sirning tabiatda keng tarqalgan turlaridan biri vodorod bog'lanishdir. Bir molekula tarkibida kimyoviy 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.

Vodorod bog'lanish tabiatda ko'p uchraydigan va molekulalar o'rtasida bo'ladigan o'zaro ta'sirning alohida ahamiyatga ega bo'lган turidir. Agar dipol momentiga ega bo'lган molekula (qutbli molekula) tarkibida vodorod atomi bo'lsa ($O - H$ yoki $N - H$ fragmentli molekula) va elektromanfiy atomlar bilan ta'sirlashsa, masalan, O , N , F yoki $C\ell$ bilan, u holda vodorod bog'lanish paydo bo'ladi. Bu o'zaro ta'sir quyidagicha belgilanadi:



bu yerda A va B – elektromanfiy atomlar, punktir esa vodorod bog'lanishini bildiradi.

Vodorod bog'lanish bitta molekula ichida bo'lishi mumkin. Bunga ichki molekular vodorod bog'lanish deyiladi. Masalan, orto-xlorfenol, orto-nitrofenol va hokazo molekulalarda ichki molekular vodorod bog'lanish kuzatiladi. Vodorod bog'lanish bir xil yoki turli xil molekulalar orasida bo'lishi mumkin. Bunga molekulalararo vodorod bog'lanish deyiladi.

Vodorod bog'lanish odatda $A-H\dots B$ ko'rinishda belgilanadi. $A-H$ guruh protonni beruvchi – donor, B guruh esa protonni qabul qiluvchi – akseptor deyiladi. Vodorod bog'lanishli komplekslarni bog'lanish enregiyasiga qarab shartli ravishda uch guruhga bo'lish mumkin:

1. Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslar, energiyasi $\Delta H \sim 1-2$ kkal/mol oraliqda bo'ladi, bunga H , N_2 , CO va hokazolarni misol qilib keltirish mumkin).

2.Tipik vodorod bog‘lanishli komplekslar, energiyasi $\Delta H \sim 2\text{--}8$ kkal/mol oraliqda bo‘ladi, bularga suv, geloidovodorodlar dimeri yoki polimerlar misol bo‘la oladi.

3.Kuchli vodorod bog‘lanishli komplekslar, energiyasi $\Delta H \sim 9\text{--}30$ kkal/mol oraliqda bo‘ladi, karbon kislotalari, fosfororganik birikmalar va hokazolar bu turdagи bog‘lanishga misol bo‘ladi.

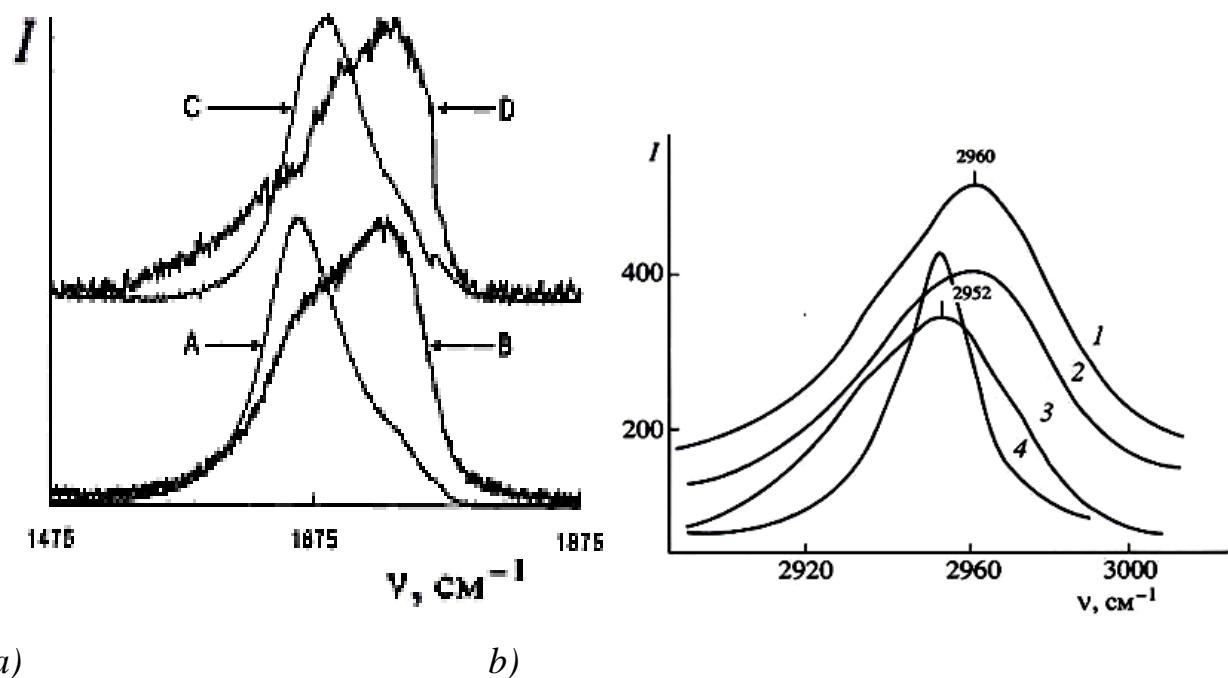
Vodorod bog‘lanish moddaning har qanday agregat holatida mavjud bo‘lib, uning spektral parametrlarining keskin o‘zgarishiga yangi polosalarning hosil bo‘lishiga olib keladi. Vodorod bog‘lanish tebranish spektrida quyidagicha namoyon bo‘ladi:

- A-H tebranishning polosasi past chastotaga tomon siljiydi. Bu siljish bog‘lanish energiyasiga qarab o‘ta kuchsiz vodorod bog‘lanishli komplekslarda bir necha sm^{-1} dan o‘ta kuchli vodorod bog‘lanishli komplekslarda 1000 sm^{-1} gacha bo‘lishi mumkin;
- A-H tebranish polosasining formasi kuchli vodorod bog‘lanishli komplekslarda tubdan o‘zgarib ketadi;
- A-H polosanining intensivligi IQ yutilish spektrida keskin ortadi;
- B guruhning spektral parametrlari o‘zgaradi.

Karbon kislotalari molekulalari suyuq holatda turli xil agregatlar hosil qiladi. Eritmalarda komponentlarning bir xil ulushida agregatlangan birikmalarning soni oshadi. Neytral eritmalarida turli tipdagи agregatlarining nisbiy tarkibi o‘zgaradi. Karbon kislotalarida vodorod bog‘lanish tufayli O-H polosa 3550 sm^{-1} dan $\sim 2700 \text{ sm}^{-1}$ gacha siljiydi. Bu polosanining yarim kengligi va intensivligi keskin ortib ketadi. Shuningdek C=O polosa ham past chastotaga tomon $\sim 40\text{--}50 \text{ sm}^{-1}$ gacha siljiydi. Yutilish spektrlarida O-H polosanining past chastota tomon siljishi esa $\sim 100 \text{ sm}^{-1}$ ni tashkil qiladi. Masalan, chumoli kislotsasi molekulalaridagi C-H guruhi vodorod atomi, molekulalararo vodorod bog‘lanish hosil qilishda faol qatnashadi.

Suyuq chumoli kislotsida yopiq dimerlar, zanjirli agregatlar va erkin C=O bog‘lanishga ega bo‘lgan agregatsiyalardan tashqari, uch molekulali agregatlar

ham bo‘lishi mumkinligi ko‘rasatildi. Bu agregatlarda vodorod bog‘lanishlar C-H va O-H guruhlarda vodorod atomlari tomonidan amalga oshiriladi. C-H guruhning vodorod atomi qatnashadigan agregatlar hosil bo‘lishi kombinatsion sochilish spektrlarida $C=O$ bog‘lanish hamda C-H bog‘lanish tebranish spektrlarida namoyon bo‘ladi. C-H bog‘lanish orqali hosil bo‘lgan vodorod bog‘lanishlar kuchsiz ekanligini tajriba natijalari ham tasdiqladi, ya’ni, toza suyuqlikda keng bo‘lgan polosa CCl_4 bilan kuchli eritmasida temperaturaning oshishi bilan keskin torayishi kuzatildi (1-rasm).

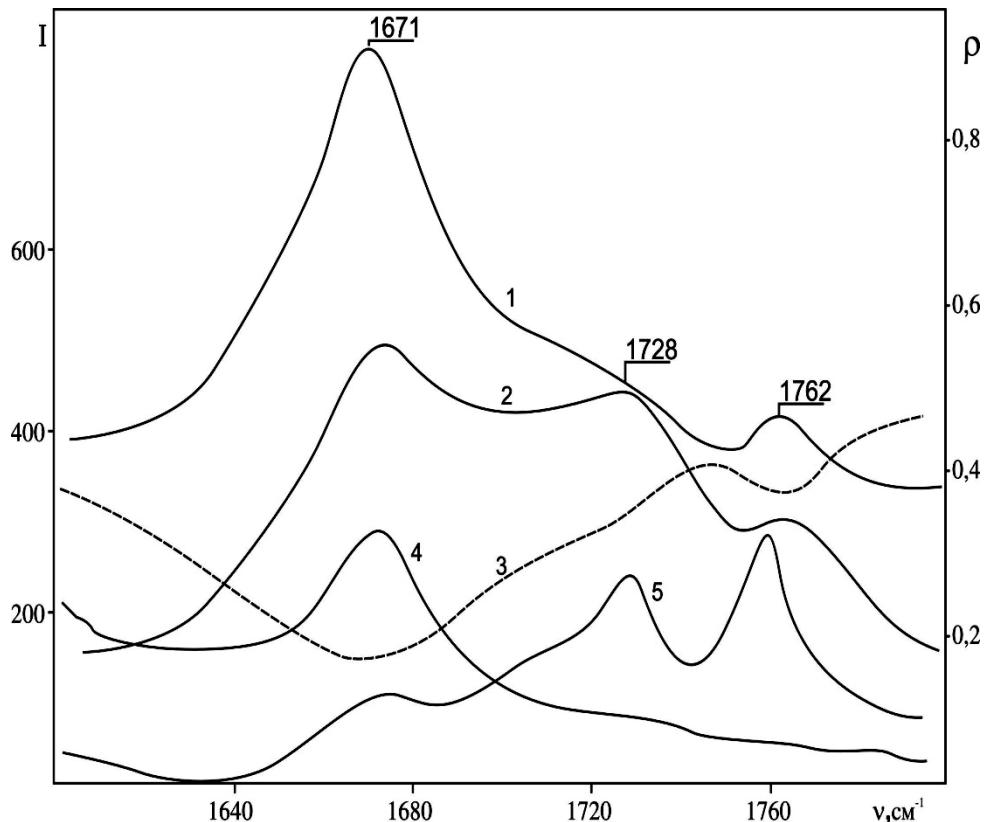


1-rasm. Chumoli kislotasi tebranish spektrlari: a) $C=O$ tebranishiga tegishli KS spektrining 25^0C temperaturada izotrop va anizatrop (A va B) hamda 100^0C temperaturada izotrop va anizatrop (C va D)tashkil etuvchilar, b) chumoli kislotasining C-H tebranishiga tegishli KS spektrlari: 1,2- toza suyuqlikda (mos rvishda anizatrop va izotrop tashkil etuvchilar); 3-suv bilan eritmasida (0,4 m.u.); 4- CCl_4 bilan eritmasida (25^0C temperaturada tuyingan eritma).

Adabiyotlardagi ma’lumotlar va bizning laboratoriyyada olib borilgan tajribalarimiz shuni ko‘rsatadiki, toza suyuq holatdagi sirkal kislotasida $C=O$

tebranish polosasiga tegishli kombinatsion sochilish spektrlarining ($I_{\parallel}(v)$) tashkil etuvchisi murakkab ekan.

Ushbu polosaning chegarasida yetarlicha kenglikka ega bo‘lgan chastotalari 1671 sm^{-1} , 1728 sm^{-1} i 1762 sm^{-1} ga teng bo‘lgan uchta chiziqni ajratish mumkin (1-rasm). Intensivligi nisbatan past bo‘lgan 1728 sm^{-1} keng chiziq, intensivligi kattaroq bo‘lgan 1671 sm^{-1} chiziqning fonida yotadi (2-rasm).



2-rasm. Suyuq holdagi toza sirka kislotsasi $C=O$ tebranish kombinatsion sochilish spektrlari (1- I_{\parallel} ; 2- I_{\perp} ; 3-depolyarizatsiya koeffitsiyenti, ρ), CCl_4 bilan eritmalarida (4-0,2–0,8 m.u.), va asetonitril bilan eritmalarida (5-0,2-0,8m.u.).
Intensivliklari bir xil masshtabga keltirilmagan.

Sirka kislotsini CCl_4 da bilan aralashmasida (2-rasm) $C=O$ tebranishga tegishli yuqori chastota tomondagi ikkita chiziqning intensivligi kuchli kamayganligi kuzatiladi. Sirka kislotsining miqdori eritmada 0,2 molyar ulushda

bo‘lganda bu polosalar umuman kuzatilmasligi ma’lum bo‘ldi. Bu holatda faqat konsentrasiya o‘zgarishi bilan o‘zgarmaydigan past chastota tomondagi chiziq kuzatiladi.

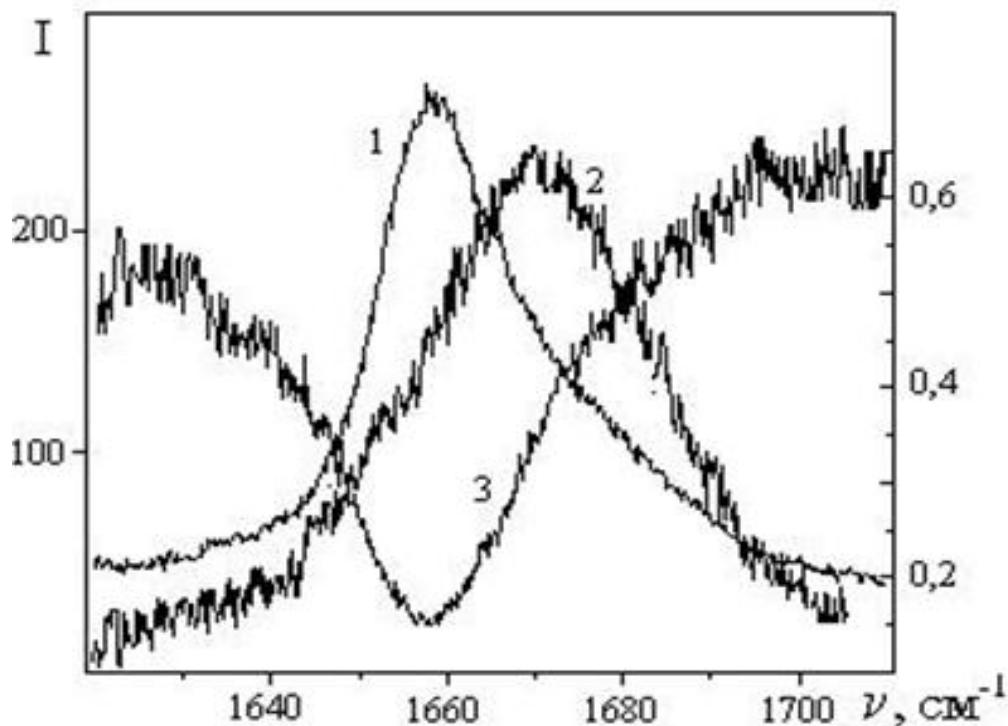
Karbon kislotalarida yopiq dimerlar hosil bo‘lishi bilan C=O tebranish polosasi past chastota tomonga siljishi va depolyarizatsiya koeffitsentlarining o‘zgarishi kuzatildi. Xuddi shunday sirka kislotasining turli erituvchilar bilan aralashmasida tegishli C=O tebranish polosasining turli xil tomonlarga siljishi, agregat va monomer molekula bilan taqqoslaganda depolyarizatsiya koeffitsiyentlarining farq qilishi, agregatlar hosil bo‘lishi bilan dipol momentining kuchli kamayishi aniqlandi.

Kombinatsion sochilish chiziqlarining anizatrop va izotrop tashkil etuvchilari bo‘yicha taqsimlanishidan molekulaning tebranma va aylanma xarakteri to‘g‘risida ma’lumot olish mumkin. Ayniqsa, kombinatsion sochilish spektrlarining anizatrop tashkil etuvchilari orqali molekulaning oriyentatsion harakati to‘g‘risida ko‘proq ma’lumot olish mumkin.

Molekulaning spektral tarkibi molekulalarning kollektiv va individual harakatlari natijasida o‘zgarib turvchi anizatropiya fluktuatsiyalari natijasida yuzaga keladi. Masalan, dimetilformamid molekulasi tarkibiga kiruvchi C=O tebranish molekulalararo o‘zaro ta’sirga juda sezgir bo‘lib, bu sezgirlik C=O tebranishning kombinatsion sochilish spektrida yaqqol namoyon bo‘ladi. Ushbu rasmdan ko‘rinib turibdiki, C=O tebranish polosasining parallel tashkil etuvchisi yuqori chastota tomondan yetarlicha sezilarli assimetriyaga ega ekanligi ko‘rinib turibdi, perpendikular tashkil etuvchisida assimetriya sezilarli bo‘lmasdan keng polosa kuzatilmoqda.

Tajriba natijalariga ko‘ra, parallel va perpendikular tashkil etuvchilarining chastotalari orasidagi farq $14,5 \text{ sm}^{-1}$ ga teng. Parallel tashkil etuvchisidagi assimetriyaga, maksimum chastotlari farqiga va depolirizatsiya koeffitsiyentining o‘ziga xos yo‘liga qarab shuni aytish mumkinki, dimetilformamidning C=O tebranishiga tegishli polosa murakkab bo‘lib, eng kamida ikkita chiziqdan iborat

bo‘lishi mumkin. Polasaning bu murakkab tuzilishiga ega bo‘lishi nimaga bog‘liq degan savol tug‘ilishi tabiiy (3-rasm).



3-rasm. Dimetilformamidning C=O tebranishiga tegishli KS spektrlari: 1-paralel, 2-perepedikulyar tashkil etuvchilar, 3-depolyarizasiya koeffitsiyenti

O‘tkazilgan tajribalarda monomer va agregatlar nisbatining va ular polasalari intensivliklarining nisbatining o‘zgarishiga qarab dimetilformamid konsentrasiyasi kamaytirilganda polasa kengligining kamayishi, uning maksimumdan o‘tishi yoki kengayishi hamda $I_{\parallel}(v)$ va $I_{\perp}(v)$ maksimumlari chastotalari mos kelmasligi hodisasida molekulalararo o‘zaro ta’sirlar tufayli molekulalar agregatsiyasi va molekulada bo‘ladigan o‘zgarishlar ham muhim rol o‘ynashligi kuzatildi.

Molekulalararo o‘zaro ta’sirlar, jumladan vodorod bog‘lanish tufayli moddalarning termodinamik parametrlari ham o‘zgarib ketadi, masalan, qaynash temperaturasi ortadi. Shuningdek, zichligi, yopishqoqligi ortadi va hokazo.

II BOB. AMALIY QISM

2.1 Tebranma aylanma polosalarning aylanma strukturasi va ikki atomli molekulalarning aylanma tebranma spektri

Tebranma-aylanma polosalarning aylanma strukturasi quyidagi ifodadagi keyingi ikki had yordamida aniqlanadi:

$$E' - E'' = \nu_{00} + B' j'(j'+1) - B'' j''(j''+1) \quad (11)$$

Molekulalarning faqat aylanma harakatiga tegishli bo‘lgan o‘tishlardan farqli bo‘lgan bu holda, aylanish doimiylari, V' va V'' lar turli tebranma holatlarga tegishlidir. Faqat aylanma harakat qaralganda esa bu doimiyliklar bitta, tebranma holatga tegishli bo‘ladi va V' hamda V'' larning farqi faqat markazdan qochma uzayish hisobiga bo‘ladi, ya’ni yuqorigi energetik sathda atomlar orasidagi masofa kattaroq, demak molekulaning o‘lchami kattaroq bo‘ladi. Tebranma aylanma harakat paytida esa V tebranish kvant soniga ham bog‘liq, ya’ni

$$B_g = B_e - \alpha_e (\vartheta + \frac{1}{2}) \quad (12)$$

Molekulalarning aylanma-tebranma harakati paytida Δj ning faqat musbat qiymatlari emas, balki manfiy qiymatlari ham shuningdek ayrim hollarda nolga teng bo‘lgan, ya’ni $\Delta j = 0, 0-0$ o‘tishlar ham mumkin bo‘ladi. Faqat aylanma harakat qaralgan paytda aylanma sathlar faqat bitta tebranma holatga tegishli bo‘lganligi uchun hamisha yuqorigi aylanma sath energiyasi pastki sath energiyasidan katta bo‘ladi va yutilish spektri uchun $j' - j'' = 1$ kombinatsion sochilish uchun esa $j' - j'' = 2$ bo‘ladi.

Tebranma-aylanma harakatda esa yuqorigi tebranma sathga tegishli aylanma sathlar pastki tebranma sathga tegishli aylanma sathlardan balandda yotadi, hatto j' ning qiymati j'' dan kichik bo‘lganda ham. Shuning uchun turli tebranma sathlarga tegishli bo‘lgan aylanma sathlar oralig‘ida $\Delta j=j'-j''$ o‘tishlar bo‘ladi. Hosil bo‘lgan chiziqlar to‘plami qanotlar deyiladi.

$$\begin{aligned}
\Delta j' - j'' = +2 & \quad S \text{ qanot} \\
\Delta j' - j'' = +1 & \quad R \text{ qanot} \\
\Delta j' - j'' = 0 & \quad Q \text{ qanot} \\
\Delta j' - j'' = -1 & \quad P \text{ qanot} \\
\Delta j' - j'' = -2 & \quad O \text{ qanot}
\end{aligned} \tag{13}$$

Infraqizil yutilish va chiqarish spektrida tebranma-aylanma sathlar uchun tanlash qoidasi dipol momentiga ega bo‘lgan molekulalar uchun $\Delta j = j' - j'' = \pm 1$ ga teng. Bunday molekulalar uchun tebranma-aylanma polosa R va P qanotlardan tashkil topgan bo‘ladi.

R qanot uchun $\Delta j = j' - j'' = +1$ bo‘lib, $v > v_0$ bo‘ladi.

R qanot uchun $\Delta j = j' - j'' = -1$ bo‘lib, $v < v_0$ bo‘ladi.

v_0 esa $\Delta j = j' - j'' = 0$ bo‘lgan o‘tishga mos keladi. (1) ifodadan bu o‘tishlar chastotasi quyidagicha topiladi, R qanot uchun

$$\nu_j = \nu_{00} + B' j(j+1) - B''(j'-1)j = \nu_{00} + (B' + B'')j + (B' - B'')j^2 \tag{14}$$

j'' va j' orqali ifodalanganda, R qanot uchun esa

$$\nu_{j''} = \nu_{00} + B' j''(j''-1) - B''(j''+1)j'' = \nu_{00} - (B' + B'')j'' + (B' - B'')j''^2 \tag{15}$$

$j'j''$ orqali ifodalangan bo‘lsa, R qanotda, agar $B' = B''$ bo‘lganda, bir-biridan teng masofada joylashgan chiziqlar kuzatiladi. $B' < B''$ hamda $v' > v''$ bo‘lganligidan bir-biriga yaqinlashib boruvchi chiziqlar hosil bo‘ladi, agar $B' > B''$ bo‘lgan holda chiziqlar bir-biridan uzoqlashar edi.

R qanotda esa $v < v_{00}$ bo‘lgan bir-biridan uzoqlashib boruvchi chiziqlar payda bo‘ladi. (14) va (15) ifodalarda $j' = m$, $m = 1, 2, 3$ va $j'' = -m$, $m = -1, -2, -3, \dots$. Bu ikkala formulani birlashtirib yozish mumkin.

$$\nu_m = \nu_{00} + (B' + B'')m + (B' - B'')m^2 \tag{16}$$

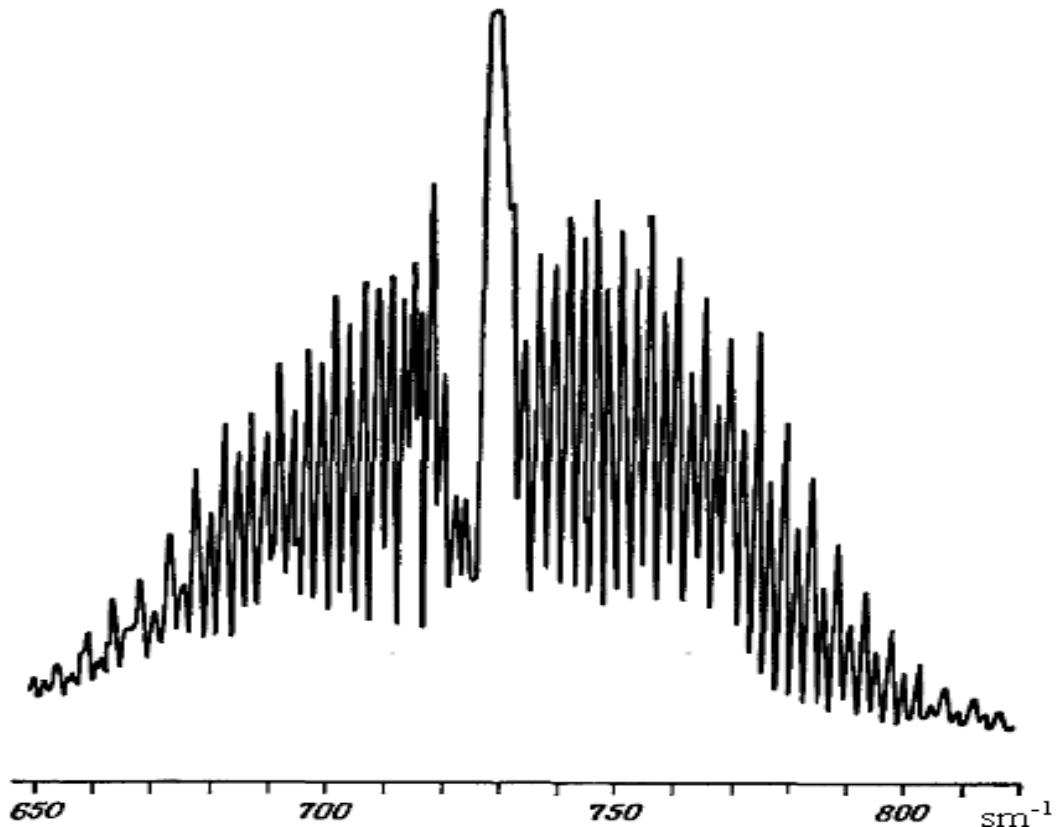
m-ning ishorasiga qarab ko‘p hollarda R qanot musbat qanot, R qanot esa manfiy qanot deyiladi. $m=0$ bo‘lgandagi nolinchi chiziq uchun (16) ifoda $B' = B''$ desak,

$$\nu_m = \nu_{00} + 2Bm \tag{17}$$

Tanlash qoidasiga binoan bu chiziq spektrda bo‘lmaydi, lekin molekulalararo o‘zaro ta’sir hisobiga bu chiziqning hosil bo‘lishini kuzatish mumkin (4-rasm). Shuningdek, agar harakat miqdorining elektron momenti noldan farqli bo‘lsa, u holda $\Delta j=0$ bo‘lgan Q qanot kuzatiladi (5-rasm). Q qanot uchun tanlash qoidasiga asosan

$$\nu_j = \nu_{00} + (B' - B'')j(j+1) \quad (18)$$

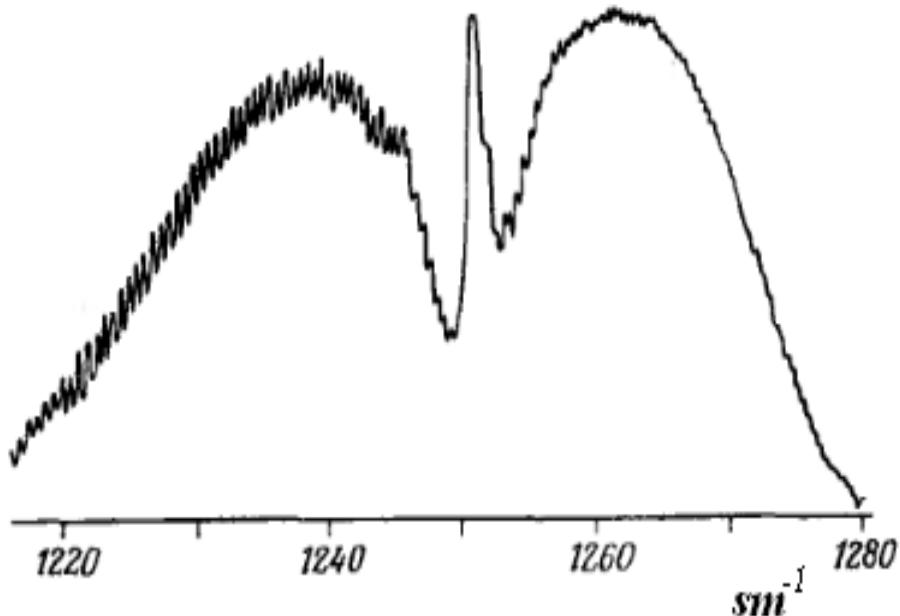
Kombinatsion sochilish spektrida esa tanlash qoidasi $\Delta j=0, \pm 2$ bo‘ladi.



4-rasm. Vodorod atomi yadrosi spinining nozik aylanma tuzilishining intensivliklari ketma-ketligini (kuchli, kuchsiz, kuchli kuchsiz, ...) namoyish qiluvchi atsetilin ($HC\equiv CH$)ning deformatsion modalari spektri.

Bu holda bir-biriga juda yaqin joylashgan Q qanot chiziqlaridan tashqari, S va O qanotlar kuzatiladi. $\Delta j=2$ bo‘lgan S qanot uchun.

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_{00} - 2B'' + (B' + 3B'')j'' + (B' - B'')j''^2 = \nu_{00} + 6B + \\ &+ (5B' - B'')j'' + (B' - B'')j''^2 \end{aligned} \quad (19)$$



5-rasm. P, Q, R tipik profilga ega bo‘lgan, simmetrik pildiroq SN_3I (metiliodid) molekulasining markazi 1251 cm^{-1} ga yaqin bo‘lgan parallel valent tebranishi spektri.

va $\Delta j = -2$ bo‘lgan O qanot uchun

$$\nu = \nu_{00} + 2B - (3B' + B'')j'' + (B' - B'')j''^2 = \nu_{00} - 6B - (5B'' - B')j' + (B' - B'')j''^2 \quad (20)$$

Bu holda $B' = B''$ bo‘lganda, bir biridan 4V masofada joylashgan chiziqlar paydo bo‘ladi. Odatda kombinatsion sochilish spektrida bitta intensiv Q chiziq kuzatiladi S va O qanotlar intensivligi past bo‘lganligi uchun ularni kuzatish qiyin (6-rasm).



6-rasm. Yutilish polosasining P, Q, R konturi (asbobning ajrata olish qobiliyati past bo‘lgan hol uchun)

Infraqizil tebranma polosalar uchun intensivliklarning aylanma sathlarida taqsimlanishi muhimdir. Intensivlik asosan pastki tebranma sathdagi aylanma sathlar to‘ldirilganligiga proporsional bo‘ladi. Shuning uchun

$$I_{\text{atom}} = C(2j'' + 1) e^{-\frac{E_j''}{kT}} = C(2j'' + 1) e^{-\frac{B'' j'' (j'' + 1)}{kT}}$$

(21)

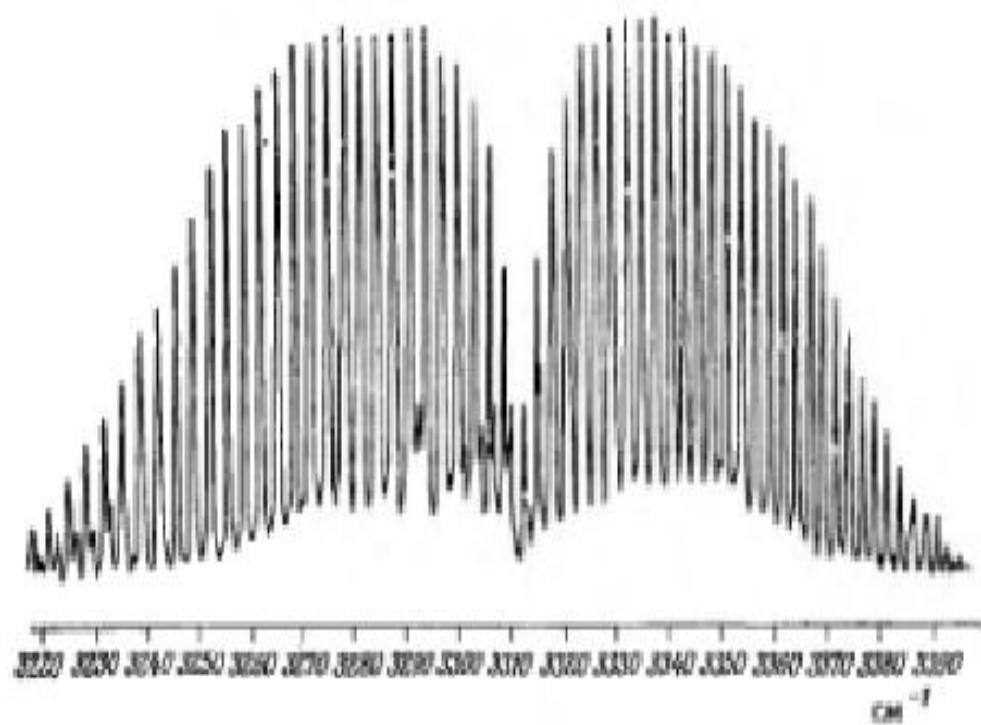
S-const T-temperaturaning o‘zgarishiga qarab R va R qanotlarda intensivliklarning taqsimlanishi turlicha bo‘ladi. R va R qanot maksimumlari orasidagi farq temperaturadan chiqarilgan kvadrat ildiziga proporsional ravishda ortadi, ya’ni $\Delta\nu \sim \sqrt{T}$ bo‘ladi.

Kichik dispersiya bo‘lganda aylanma chiziqlar bir-biriga qo‘silib ketib, Vyerum dubleti deb ataluvchi dublet hosil bo‘ladi. Keltirib o‘tilgan ayrim molekulalarning tebranma-aylanma spektrlaridan spektral asboblarni graduirovka qilishda foydalanish mumkin.

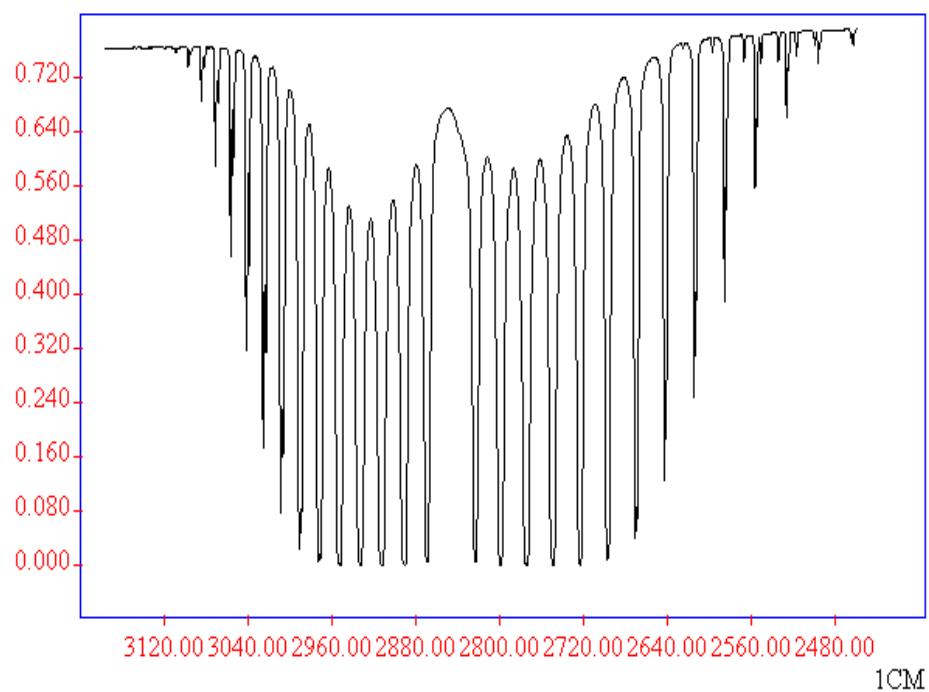
Ikki atomli molekulalarning aylanma tebranma spektri

Ikki atomli molekulalarning aylanma tebranma spektrini qarab chiqamiz. Bunday spektrga infraqizil sohada barcha har xil atomdan tashkil topgan $S_{\infty 9}$ simmetriyadagi molekulalar ega bo‘ladi. Kombinasion sochilish spektrida barcha $S_{\infty 9}$ va $D_{\infty 9}$ simmetriyadagi molekulalar ega bo‘ladi. Tebranma sathlar orasidagi o‘tishlar bir vaqtda aylanish energiyasining o‘zgarishi bilan kuzatiladi.

Aylanish energiyasining qiymati tebranish energiyasining qiymatidan kam bo‘lganligidan tebranish spektrining polosasi aylanma strukturaga ega bo‘ladi, ya’ni agar spektral asbob molekulaning tebranma spektrini kichik dispersiya bilan (kichik ajrata olish qobiliyati bilan) yozganda keng bitta polosa kuzatiladigan bo‘lsa, katta dispersiya bilan yozganda, ya’ni ajrata olish qobiliyati yuqori bo‘lganda shu bitta polosa alohida chiziqlarga ajraladi (7, 8-rasmlar).



7-rasm. HCN molekulasi S-N simmetrik valent tebranishi tebranma-aylanma spektri, P va R qanotlar chiziqlari.



8-rasm. HCl molekulasining tebranma-aylanma spektri, P va R qanotlar chiziqlari.

Alovida o'tishlarda energiyaning o'zgarishini $\Delta E = E'' - E'$, desak, $E' -$ pastki va $E'' -$ yuqorigi sath energiyalarining har biri tebranma va aylanma energiyalarning yig'indisiga teng bo'ladi.

$$E'' = E_g + B_g j'' (j'' + 1) \quad (21)$$

yuqori sath energiyasi.

$$E' = E_g + B_g j' (j' + 1) \quad (22)$$

pastki sath energiyasi. Bu ifodalarda

$$E_g = \nu_e (\vartheta + \frac{1}{2}) - \nu_e x_e (\vartheta + \frac{1}{2})^2 \quad (23)$$

bu ifodaning ikkinchi hadi tebranishning angarmonikligini xarakterlaydi. (21) va (22) ifodalarda aylanish bilan tebranish orasidagi bog'lanish aylanish doimiysi V_g yordamida hisobga olinadi. V_g aylanish doimiysi tebranish kvant soni ϑ -ning funksiyasidir.

$$B_g = B_e - \alpha_e (\nu + \frac{1}{2}) \quad (24)$$

α_e -doimiy son, masalan HCl molekulasi uchun $\vartheta=0$, $\vartheta=1$ sathlar uchun aylanish doimiysi $B_0=10,440\text{sm}^{-1}$, $B_1=10,137\text{sm}^{-1}$, $\alpha=0,303$ ga teng. (24) ifodaga asosan ϑ -kvant sonining ortishi bilan aylanish doimiysi kamaya boradi. (21) va (22) ga asosan

$$E' - E'' = E_g - E_g + B_g j' (j' + 1) - B_g j'' (j'' + 1) \quad (25)$$

$E_g - E_g$ -ayirma $j' - j'' = 0$ bo'lganda, faqat tebranma o'tishlarga tegishli bo'lgan ν_{00} chastotani beradi. 0-0 o'tishlar taqiqlanganligidan bu chiziq infraqizil yutilish spektrida kuzatilmaydi va u hisoblash yo'li bilan topiladi. Tebranma sathlarda o'tishlar energiyasi aylanma sathlarda o'tishlar energiyasidan katta bo'lganligidan, ya'ni

$$E' - E'' \succcurlyeq B_g j' (j' + 1) - B_g j'' (j'' + 1) \quad (26)$$

bo'lganligidan spektrda polosaning holati ν_{00} chiziqning holati bilan aniqlanadi.

Garmonik tebranish uchun tanlash qoidasi $\Delta\vartheta = \pm 1$ ya'ni $\vartheta - \vartheta'' = 1$, lekin tebranish angarmonik bo'lganligidan $\vartheta - \vartheta'' = K$ bo'lgan o'tishlar ham mumkin bo'ladi.

Tebranma sathlar orasida bunday o'tishlar chastotasi (3) ga asosan.

$$\begin{aligned} E_{\vartheta} - E_{\vartheta''} &= E_{\vartheta} - E_{\vartheta''} = E_{\vartheta+k} - E_{\vartheta''} = \nu_e \left(\vartheta'' + k + \frac{1}{2} \right) - \\ &- \nu_e x_e \left(\vartheta'' + k + \frac{1}{2} \right)^2 - \nu_e \left(\vartheta'' + \frac{1}{2} \right) + \nu_e x_e \left(\vartheta'' + \frac{1}{2} \right)^2 = \\ &= K \left[\nu_e - \nu_e x_e (2\vartheta'' + k + 1) \right] \end{aligned} \quad (27)$$

Yutilish va kombinatsion sochilishda $\vartheta=0$ bo'lgan nolinchi tebranma sathdan $\vartheta''=1,2,3$ bo'lgan sathlarga o'tishlar muhimdir, ya'ni

$$\nu_{0,\vartheta} = \Delta E_{0,\vartheta} = k(\nu_e - \nu_e x_e (k+1)) \quad (28)$$

Odatda $\vartheta''=1$ bo'lgan 0-1 asosiy chastotadan tashqari, ya'ni

$$\nu_{0,1} = \Delta E_{0,1} = \nu_e - 2\nu_e x_e \quad (29)$$

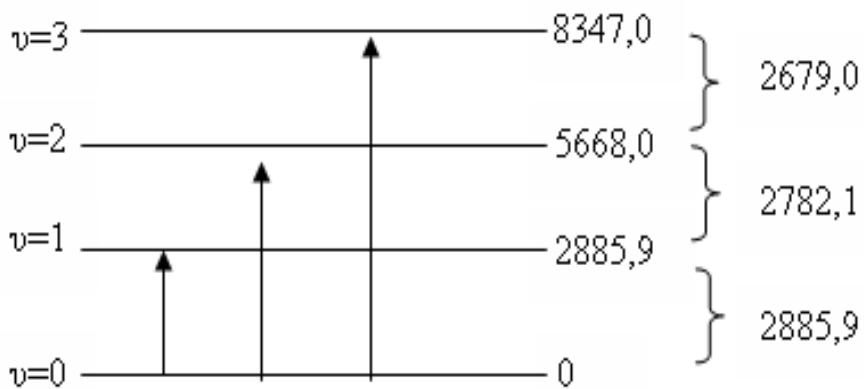
$\nu_{0,1}$ dan tashqari, tebranishning angarmonikligi tufayli $k=2,3$ bo'lgan obertonlar ham kuzatiladi, $k=2$ bo'lgan oberton chastotasi

$$\nu_{0,2} = \Delta E_{0,2} = 2(\nu_e - 3\nu_e x_e) \quad (30)$$

bo'ladi va $k=3$ bo'lganda 2-oberton kuzatiladi.

$$\nu_{0,3} = \Delta E_{0,3} = 3(\nu_e - 4\nu_e x_e) \quad (31)$$

HCl molekulasi uchun 0-1 o'tishli asosiy chastota 2886 sm^{-1} bo'lsa, undan tashqari 1-2, 3 obertonlar kuzatilishi mumkin (9-rasm). Odatda obertonlar chastotasi xe noldan farqli bo'lganligi tufayli asosiy chastotadan aniq 2-3 marta katta bo'lmaydi, balki farq kamayib boradi. K ning orta borishi bilan obertonlarning intensivligi keskin kamayib boradi.



9-rasm. HCl molekulasining asosiy chastotasi va obertonlari

Angarmoniklik qancha kichik bo'lsa, obertonlar intensivligi shunchalik tez kamayadi. Shu narsani esda tutish kerakki, obertonlar intensivligining keskin kamayishi faqat angarmoniklikka bog'liq bo'lmasdan, balki molekulaning elektrooptik parametrlariga ham bog'liq, ya'ni dipol momenti va qutblanuvchanlik bilan tebranish koordinatalari orasidagi bog'lanish chiziqli emasligiga bog'liq. Masalan, dipol momentini tebranish koordinatalari bo'yicha qatorga yoyganda

$$\mu(q) = P_0 + \left(\frac{\partial \mu}{\partial q} \right)_{q=0} + q + \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial q^2} \right)_{q=0} q^2 + \dots$$

kvadratik va kubik hadlarning qiymatlari kichik bo'lganligidan obertonlarning intensivligi ham kamayib boradi. Molekulaning tebranma spektrini o'rganishda izotopik effekt muhim rol o'ynaydi. Ayniqsa bu vodorodni deyteriy (D) bilan almashtirganda, ya'ni massa ikki marta oshganda sezilarli bo'ladi, ya'ni

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

ga asosan massa 2 marta ortganda chastota $\sqrt{2}=1,41$ marta kamayadi. Shuningdek, Cl³⁵ Cl³⁷, O¹⁶ O¹⁸ va hokazolarning massalari turlicha bo'lganligi sababli chastotasi bir-biridan farq qiladi.

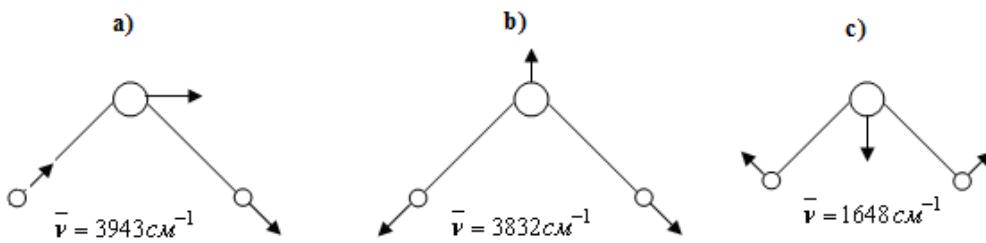
2.2 Molekulalarning tebranma harakati va ikki atomli molekulalarning tebranish energiyasi

Ikki atomli molekulalarning tebranishini qarash uning spektroskopiyadagi ahamiyatidan tashqari ko‘p atomli molekulalarning xususiy holi sifatida ham muhimdir. Ko‘p atomli molekulalar tebranishini turli chastotali alohida normal tebranishlar to‘plamidan iborat deb qarash mumkin. Bularning har biri yadroning muvozanat vaziyati atrofida o‘zgarib turishini xarakterlab ikki atomli molekulalarning tebranishiga o‘xshashdir va yadrolar orasidagi masofaning davriy ravishda o‘zgarib turishini bildiradi. Ko‘p atomli molekulalarda simmetriya nuqtayi nazaridan tebranish to‘liq simmetrik va nosimmetrik sinflarga bo‘linadi.

Molekulaning to‘liq simmetrik tebranma harakati paytida uning simmetriyasi o‘zgarmaydi, ya’ni tebranma harakat tufayli olingan, yangi konfiguratsiyaning simmetriyasi molekulaning muvozanat vaziyati paytidagi simmetriyasi bilan bir xil bo‘ladi.

Nosimmetrik tebranishda esa molekulaning yangi konfiguratsiyasining simmetriyasi uning muvozanat holatidagi simmetriyasiga mos tushmaydi, ya’ni molekulaning simmetriyasi buziladi. Masalan, H_2O molekulasining to‘liq simmetrik tebranishda O-H masofalarning har ikkalasi bir xilda uzayishi yoki qisqarishi mumkin. Bu simmetrik tebranish bo‘lib, bu tebranishda molekulaning simmetriyasi o‘zgarmaydi (10-rasm).

Shuningdek, HOH burchakning o‘zgarishiga mos keluvchi tebranishda ham molekulaning simmetriyasi o‘zgarmaydi. Nosimmetrik (to‘liq bo‘lmagan simmetrik) tebranishda OH masofalardan biri uzaysa, ikkinchisi qisqaradi. Bunday tebranishga antisimmetrik tebranish deyiladi (10-a rasm). Simmetrik tebranishda molekulaning S_{2v} simmetriyasi saqlanadi. Asimetrik tebranishda esa u yangi S_S simmetriyaga ega bo‘ladi.



10-rasm. Suv molekulasining uchta tebranish chastotasi.

Shuningdek, ko‘p atomli chiziqli CO_2 yoki C_2H_2 molekulasini ham qarashimiz mumkin. Bunda molekulalarning simmetrik tebranishi to‘liq simmetrik tebranish bo‘lib, antisimmetrik va diformatsion tebranishi esa nosimmetrik tebranish bo‘ladi. Birinchi holda molekulaning $D_{\infty h}$ simmetriyasi saqlansa, deformatsion tebranishda u S_{2v} simmetriyaga ega bo‘ladi, antisimmetrik tebranishda esa $S_{\infty v}$ simmetriyaga ega bo‘ladi.

Ikki atomli molekulalarning tebranma harakati paytida uning simmetriyasi buzilmaydi.

Ikki atomli hamda ko‘p atomli molekulalarning tebranishini mexanik nuqtayi nazardan garmonik tebranish deb qarash mumkin, ya’ni sinusoidal qonunga bo‘ysinuvchi tebranish deb qarash mumkin.

Ikki atomli molekulalar elektron energiyasining yadrolar orasidagi masofaga bog‘liqligini qaraganimizda bu energiya ρ ning funksiyasi sifatida yadro harakati uchun potensial energiya rolini o‘ynashini ko‘rgan edik. Uning qiymati quyidagiga teng

$$U(q) = \frac{1}{2} k q^2 \quad (32)$$

bu yerda $q = \rho - \rho_e$ tebranish koordinatasi, k -yadrolar muvozanat vaziyatidan chiqqan paytda vujudga keladigan kvazielastik kuchni xarakterlovchi kuch doimiysi. Bu funksiyaning grafigi parabola bo‘ladi. Tebranayotgan molekulaning kinetik energiyasi quyidagiga teng bo‘ladi.

$$T = \frac{1}{2} M \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} M q'^2 = T(q) \quad (33)$$

M–keltirilgan massa. Shunday qilib, biz garmonik ossilator, haqidagi klassik mexanik masalaga kelamiz. Uning yechimi:

$$q = q_0 \sin(\omega t + \varphi) \quad (33)$$

garmonik tebranishni beradi. q_0 – tebranish amplitudasi, φ -boshlang‘ich fazasi, ω - siklik chastota

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} = \sqrt{\frac{K}{M}} \quad (35)$$

(3) ga asosan tebranayotgan molekulaning potensial energiyasi

$$U = \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}kq_0^2 \sin^2(\omega t + \varphi) \quad (36)$$

Kinetik energiya esa (3) dan vaqt bo‘yicha hosila olsak,

$$\dot{q} = \frac{dq}{dt} = q_0\omega \cos(\omega t + \varphi) \quad (37)$$

bo‘ladi. Buni (2) ga qo‘ysak va $M\omega^2=K$ ekanligini inobatga olsak, u holda quyidagiga ega bo‘lamiz:

$$T = \frac{1}{2}M\dot{q}^2 = \frac{1}{2}Mq_0^2\omega^2 \cos^2(\omega t + \varphi) = \frac{1}{2}Kq_0^2 \cos^2(\omega t + \varphi) \quad (38)$$

Tebranayotgan molekulaning to‘liq energiyasi potensial va kinetik energiyalar yig‘indisiga teng bo‘lib, tebranish paytida doimiy qoladi.

$$E = T + U = \frac{1}{2}kq_0^2 \cos^2(\omega t + \varphi) + \frac{1}{2}kq_0^2 \sin^2(\omega t + \varphi) = \frac{1}{2}kq_0^2 \quad (39)$$

$q=q_0$ va $q=-q_0$ bo‘lganda to‘liq energiya potensial energiyaga teng bo‘ladi (11-rasmda A va S nuqtalar), tezlik quyidagiga teng bo‘ladi.

$$\frac{\partial q}{\partial t} = q_0\omega \cos(\omega t + \varphi)$$

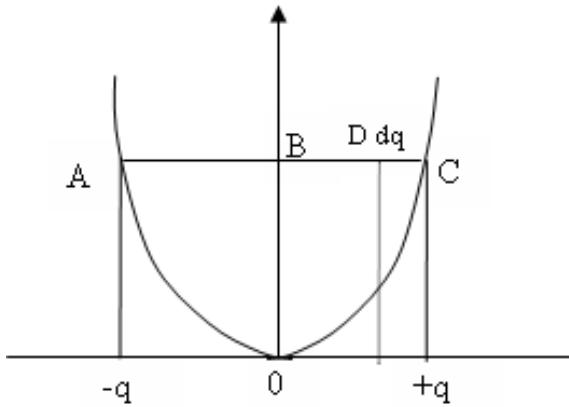
Kinetik energiya esa nolga teng bo‘ladi. $\sin(\omega t + \varphi) = \pm 1$, $\cos(\omega t + \varphi) = 0$, $q=0$ bo‘lganda esa, ya’ni muvozanat vaziyatidan o‘tayotganda tezlikning absolut qiymati eng yuqori qiymatga ega bo‘ladi (11-rasmda V nuqta).

$$[\sin(\omega t + \varphi) = 0, \cos(\omega t + \varphi) = \pm 1]$$

to‘liq energiya kinetik energiyaga teng bo‘ladi, potensial energiya esa nolga teng bo‘ladi. D nuqta AS kesma bo‘yicha $v=1/T$ chastota bilan tebranib turadi (11-

rasm). (4) ga asosan D ning qiymati ikkita, ulardan biri kvazielastik kuch, ikkinchisi keltirilgan massa doimiyliklarning ko‘paytmasidan iborat bo‘ladi.

$$\omega^2 = D = \frac{1}{M} K \quad (40)$$



11-rasm. Garmonik ossilatorning tebranish energiyasi grafigi.

Kvant mehanikasida garmonik ossilatorning tebranish energiyasi

$$E_g = h\nu \left(g + \frac{1}{2} \right) \quad (41)$$

Bu yerda ν -klassik chastota $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{M}}$, g -tebranish kvant soni $g=0,1,2,\dots$ qiymatlar oladi. Tebranish energiyasining sathlari bir-biriga teng masofada joylashgan va aynimagan bo‘lib, energiyalar farqi (41) ga asosan quyidagicha bo‘ladi.

$$E_{g+1} - E_g = h\nu \quad (42)$$

Bundan, ν -chastota quyidagiga teng bo‘ladi.

$$\nu = \frac{E_{g+1} - E_g}{h} \quad (43)$$

Shunday qilib, kvant va klassik nazariya orasida muhim munosabat mavjud. Qo’shni tebranma energetik sathlar orasidagi o‘tishlar chastotasi klassik chastota bilan mos tushadi. Klassik nazariyadan farqli bu holda eng kichik energiya nolga teng bo‘lmaydi, balki

$$E_0 = \frac{h\nu}{2} \quad (44)$$

bo‘ladi, ya’ni molekula $g=0$ bo‘lgan asosiy energetik sathda ham ma’lum energiyaga ega bo‘ladi. Molekulaning tebranish energiyasi bir necha yuzdan bir

necha ming sm^{-1} gacha bo‘lganligi tufayli asosiy sath energiyasi ham shu tartibda bo‘ladi. (42) va (44) ifodalardan quyidagiga ega bo‘lamiz:

$$E_g = \frac{1}{2} K q_{0,g}^2 = h \nu \left(g + \frac{1}{2} \right) \quad (45)$$

bundan,

$$q_{0,g} = \sqrt{\frac{2E_g}{K}} = \sqrt{\frac{2h\nu\left(g + \frac{1}{2}\right)}{M\omega^2}} = \sqrt{\frac{h\left(g + \frac{1}{2}\right)}{\pi M\omega}} = \sqrt{\frac{h\left(g + \frac{1}{2}\right)}{2\pi^2 M \nu}} \quad (46)$$

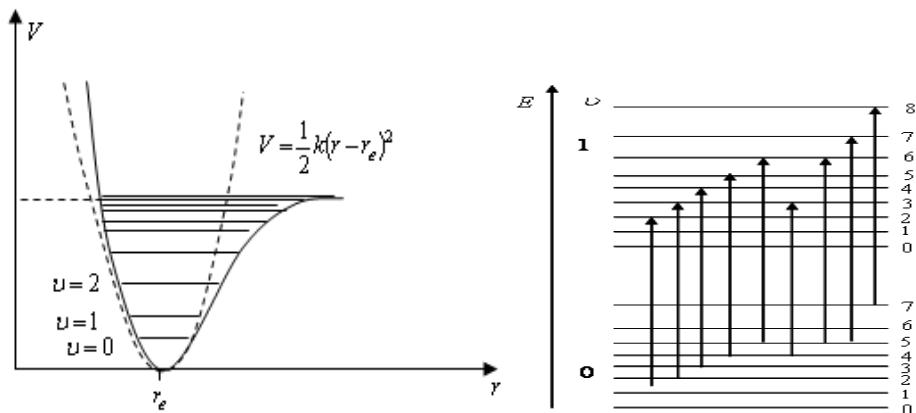
$\omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$ ekanligidan.

$$q_{0,g} = \sqrt{\frac{h\left(g + \frac{1}{2}\right)}{\pi \sqrt{KM}}} = \sqrt{\frac{h}{\pi}} \frac{h}{\sqrt[4]{KM}} \sqrt{g + \frac{1}{2}} \quad (47)$$

ya’ni, g ning berilgan qiymatlarida tebranish amplitudasi keltirilgan massa va kuch doimiyliklaridan chaqirilgan to‘rtinchchi darajali ildizga teskari proporsional ekan. Agar doimiyliklarning son qiymatlarini qo‘yib, birliklarni \AA ga keltirsak, u holda quyidagini olamiz:

$$q_{0,g} = 8,2 \sqrt{\frac{g + \frac{1}{2}}{M \nu}} \text{\AA} \quad (48)$$

Vodorod H_2 molekulasi uchun asosiy sathda $q_0=0,12 \text{ \AA}$ chiqadi va $M=M_n/2=1/2$, $\nu=4400 \text{ sm}^{-1}$ $\rho_e=0,74 \text{ \AA}$ ga teng bo‘ladi.



12-rasm. HCl molekulasida $g=0,1,2,3$ sathlardagi o‘tishlar

Garmonik ossilator energetik sathlari orasidagi tebranma o'tishlar tanlash qoidasiga asosan $\Delta\theta=\pm 1$ ga bo'ysinadi, ya'ni o'tishlar faqat qo'shni tebranma sathlar orasidagina bo'lishi mumkin. Bu tanlash qoidasi ham yutilish, chiqarish spektri uchun, ham kombinatsion sochilish spektri uchun o'rinnlidir. Bunga asosan $\Delta\theta=2,3,4$ o'tishlar taqiqlangan.

III BOB. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

3.1 Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrlari.

Bog'lanish energiyasi Van-der-Vaals o'zaro ta'sir energiyasidan farq qilmaydigan komplekslar mavjudligi uzoq infraqizil soxada aylanish spektrlari yordamida o'r ganilgan bunday o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalarning spektral parametrik quydagi jadvalda keltirilgan.

I-jadval

AH	B	R, Å	γ^0	μ, D	$\omega_\sigma, \text{sm}^{-1}$	ω_B, sm^{-1}	D_e
HCl	Ar	3,85	41,5	0,811			
HCl	Kr	4,11	37,7		32,5	52,9	180
HCl	Xl	4,27	34,5		33,9	56,8	298
HF	N ₂	3,08	26,5		100		607
HCl	N ₂	4,21	19,2	1,244			
HF	CO	3,04	21,9		125		987
HCl	CO	4,31	23,0	1,518	69	288	569
HCl	C ₂ H ₄	3,70			87		643
HCl	C ₂ H ₄	3,72			86,3		663

Bu yerda R o'zaro ta'sirlashuvchi A-H...B ta'sirlar orasidagi masofa, γ_0 ular orasidagi burchak, μ -dipol momenti, ω_σ -H...B bog'lanishning tebranish chastotasi, ω_β -deformatsion tebranish chastotasi, Dj-potensial energiya egrisining chuqurligi. Bunda aylanish spektridan aylanish doimiyligi

$$B = \frac{\hbar}{2m} r^2 \quad (49) \quad \text{topiladi.}$$

D_j-markazdan qochma uzayishi va yadro kvadrupol o'zaro ta'sir doimiyliklari aniqlanadi. Ulardan o'zaro ta'sirlashuvchi molekulalar o'rtasidagi masofa va burchaklar topiladi. Aylanish spektridan to'g'ridan-to'g'ri molekulalararo ta'sir to'g'risida ma'lumot olib bo'lmaydi, lekin o'zaro ta'sir tufayli vujudga keladigan tebranish chostotalarini hisoblab topish mumkin. Uzoq IQ sohada olingan tajriba natijalariga ko'ra CO...HCl kompleksining strukturasi quyidagicha

(13-rasm) va uning parametrlari $R=4.31\text{Å}^0$, $\gamma=23^0$ va $\beta=3.7^0$. Bunday tajribaga ko'ra kompleks chiziqli emas, balki molekulalar bir-biriga nisbatan ma'lum burchak hosil qilgan.

Agar o'zaro ta'sirlashuvchi sistemani qayta bog'langan deb hisoblasak, u holda aylanish doimiyligi

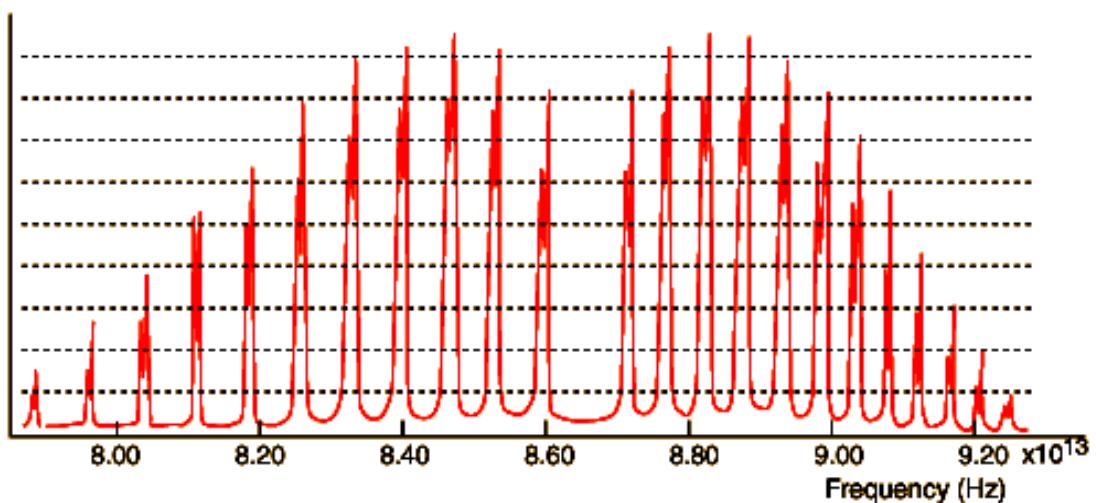
$$B_D = h/(8\pi^2 \mu R^2) \quad (49)$$

ni aniqlab. v_σ -valent tebranish chastotasini topish mumkin. μ -keltirilgan massa.

$$v_\sigma = 3B_D^2/D_j \quad (50)$$

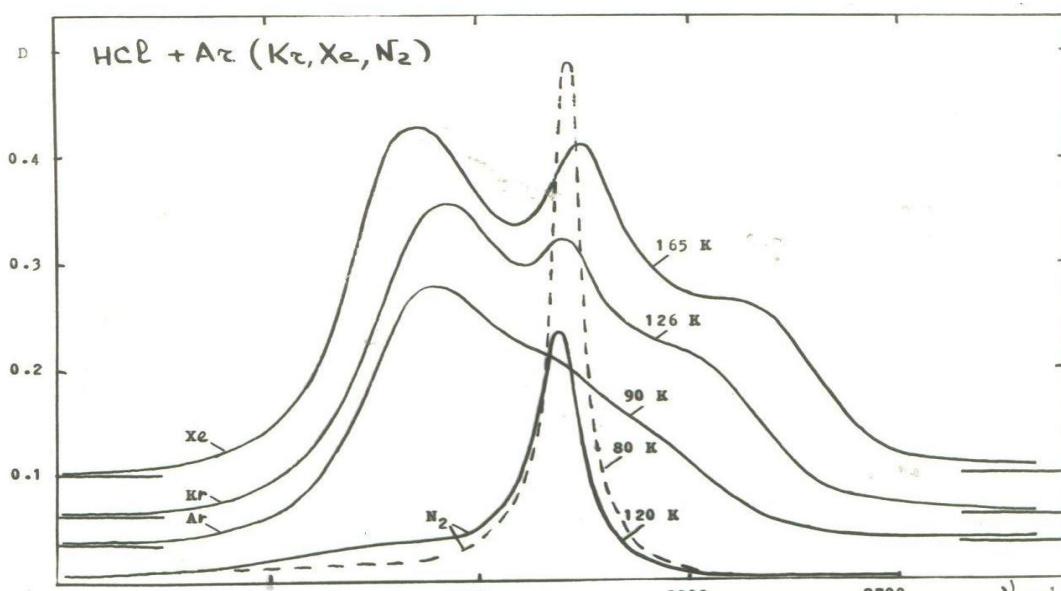
Kompleksning geometriyasi akseptordagi elektron bulutning taqsimotiga bog'liq. Agar bitta erkin juft elektron bo'lganda kompleks chiziqli bo'lsa (H_2 , CO , $HCN\dots$) π -elektronlar ishtirokidagi (C_2H_2 , C_2H_4) komplekslar o'zaro perpendikulyar ya'ni T-shaklda bo'ladi. Bunday komplekslarni vodorod bog'lanishli komplekslar deyish mumkinmi?

Gap shundaki, bunday Van-der-Vaals komplekslardan tipik vodorod bog'lanishli kompleksga o'tganda parametrlarning prinsipal o'zgarishlari kuzatilmaydi. Faqat potensial o'ra chuqurligi va μ - dipol momenti miqdori ortib boradi. Endi kuchsiz vodorod bog'lanishlarni qaraylik. Ma'lumki ikki atomli HCl molekulasi gaz xolatda IQ soxada P va R qanotlardan tashkil topgan tebranma-aylanma strukturali yutulish polasasiga ega bo'ladi (14-rasm).



14-rasm. HCl molekulasining gaz holatidagi tebranma-aylanma IQ yutilish spektri

HCl gazi past temperaturali inert suyuq erituvchilarda (Ar , Kr , Xe)da eritilganda aylanma struktura yo'qoladi va molekulalararo o'zaro ta'sir tufayli Q komponenta ham hosil bo'ladi. 0-0 o'tishlarga mos keluvchi v-chastotaning holati murakkab polosaning strukturasi kvanto-ximik hisoblash yo'li bilan topiladi . (15-rasm).

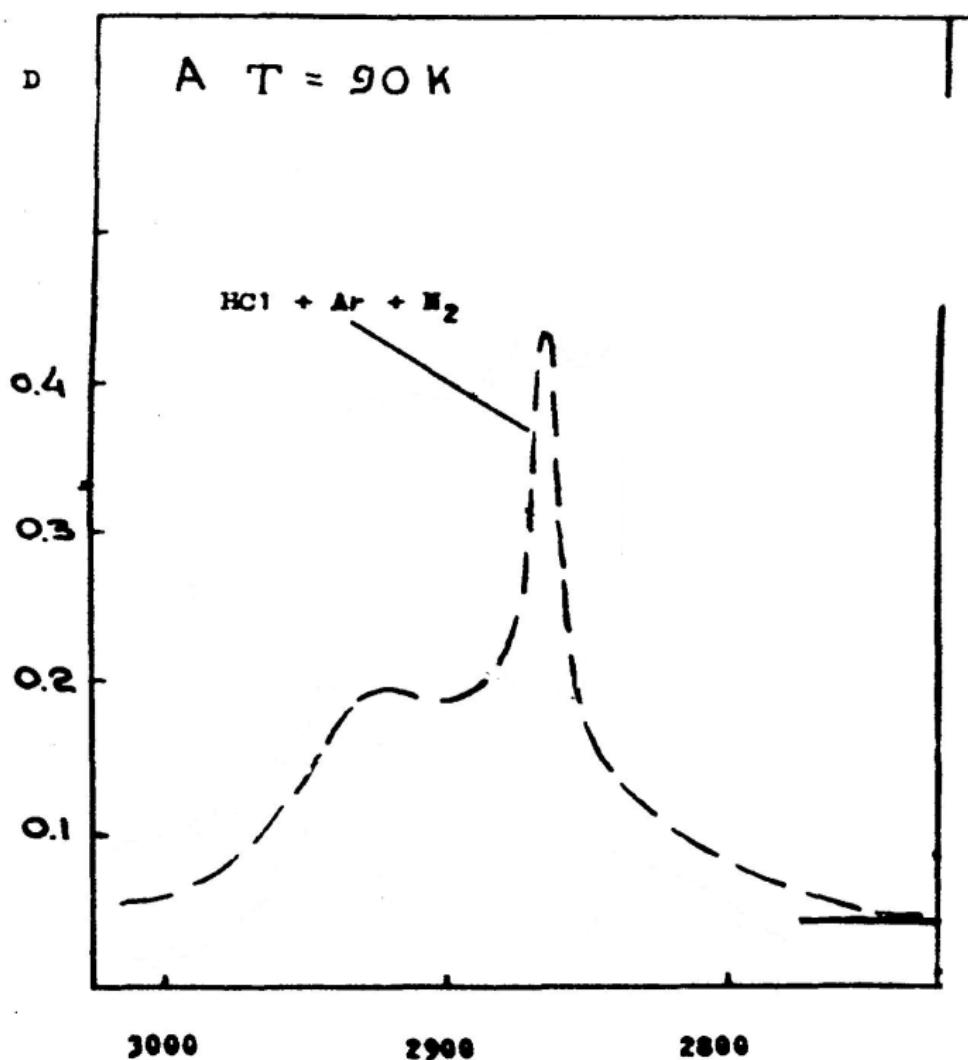


15-rasm. HCl molekulasining Ar , Kr , Xe , N_2 erituvchilardagi IQ yutilish spektri

HCl molekulasi suyuq azotda eritilganda keng va murakkab polosa o'miga ingichka yangi polosa vujudga keladi. Bu polosaning tebranish chastotasi $v \sim 2861 \text{ sm}^{-1}$ ga teng bo'lib, uning yarim kengligi taxminan $\Delta v_{1/2} \sim 18 \text{ sm}^{-1}$ ga teng.

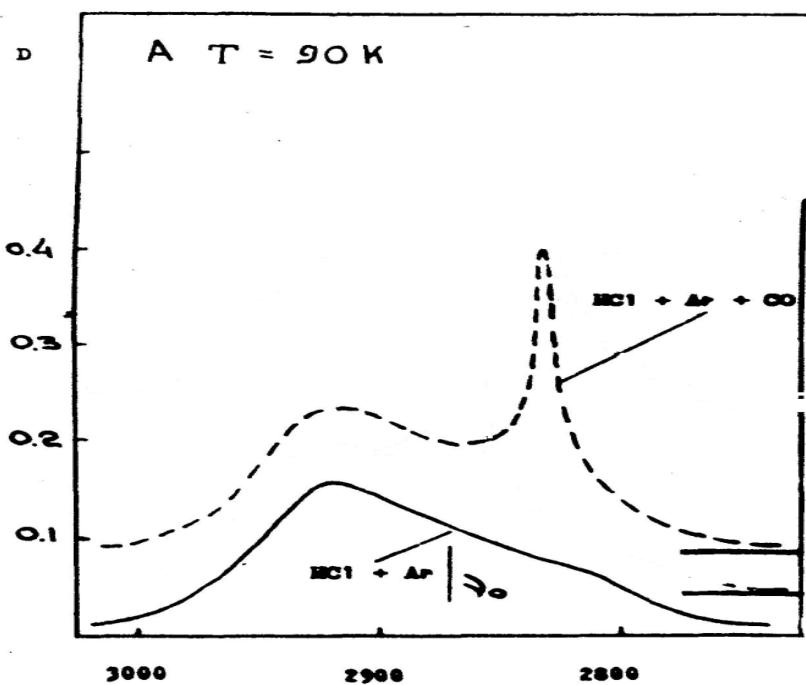
Hosil bo'lgan bu yangi polosani HClning azot bilan hosil qilgan kompleksiga tegishli deyish mumkin. Bunda kompleks hosil bo'lishi natijasida yangi sistemaning inersiya momenti ortib aylanma harakatning tormozlanishi yuzaga keladi va faqat tebranma harakat qoladi.

HCl+Ar+N₂ aralashmasida, ham erkin harakatlanayotgan HClga tegishli polosa va uning past chastotali qanotida HCl+N₂ ga tegishli ingichka polosa kuzatiladi (16-rasm).



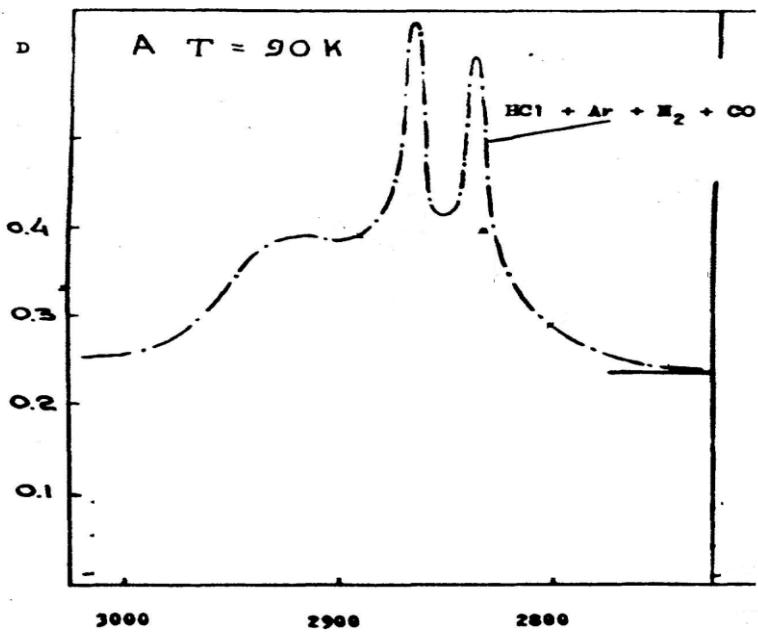
16-rasm. HCl+Ar+N₂ aralashmasining IQ yutilish spektri

Xuddi shunday manzara HCl+Ar ning CO aralashmasida ham kuzatiladi (17-rasm).



17-rasm. $HCl+Ar+CO$ aralashmasining IQ yutilish spektri

HCl ning suyuq Ar dagi eritmasiga bir vaqtda kam miqdorda ham azot, ham uglerod oksidi (CO) qo'shilsa, ularning har biriga tegishli polosa bir vaqtda kuzatiladi (18-rasm).



18-rasm $HCl+Ar+N_2+CO$ ning IQ yutilish spektri

Demak vodorod xlorid molekulasi azot va uglerod oksidi bilan o'zarota'sirlashishi natijasida vodorod xloridning spektral parametrlari keskin o'zgarar ekan. Bu o'zgarishlarda vodorod bog'lanishli komplekslarning belgilari (past chastota tomon siljish, integral intensivlikni ortishi) kuzatilganligi uchun ularni kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslar deb qarash mumkin. Adabiyotlardan bu bog'lanish energiyasi 1 kkal/mol ekanligi aniqlangan [10].

3.2 CO+HCl va N₂+HCl komplekslarni kvanto-ximik hisoblash natijalari

Vodorod xlorid molekulasining N₂-azot va CO molekulalari bilan kompleks hosil qilgan komplekslari Gauissan-09 programmasi yordamida mp2(6-311++g(3df,3pd) dastur yordamida hisoblanib quyidagicha parametrlar aniqlandi.

Hisoblash usuli mp2 (6-311++g(3df,3pd)



Masofalar

$$R(CO)=1.1363 \text{ \AA}^0$$

$$R(HCl)=1.2726 \text{ \AA}^0$$

$$R(H\ldots O)=2.2942 \text{ \AA}^0$$

Zaryadlar taqsimoti

O -0.305047

C 0.274856

Cl -0.328609

H 0.358800

Dipol momenti 1.8615 Debay,

energiyasi -573,4412541 ga teng.

CO...HCl kompleksining garmonik tebranish chastotalari va intensivliklari

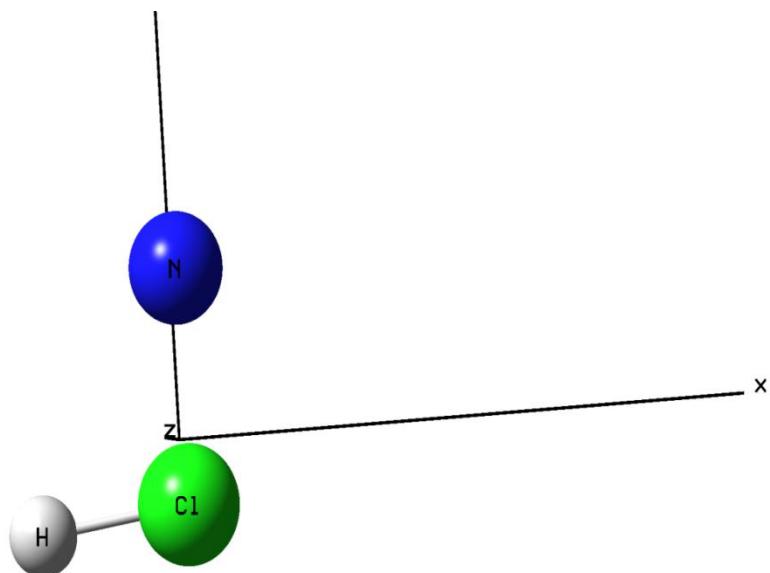
Chastota

664.2

Intensivlik

88

832.3	28
2750	285



Masofalar

$$R(\text{HCl}) = 1.3070 \text{ \AA}^0$$

$$R(\text{N}^+ \dots \text{HCl}) = 1.7312 \text{ \AA}^0$$

$$R(\text{HClN}^+) = 96 \text{ \AA}^0$$

Dipol momentlari $d_x = -1.5349$, $d_y = -0.9733$, $d_z = 0.00000$, $d = 1.8175$ energiyasi -514.4157734 ga teng.

Zaryadlar taqsimoti

$$\text{N} 0.254280$$

$$\text{Cl} 0.429293$$

$$\text{H} 0.316427$$

$\text{N}^+ \dots \text{HCl}$ kompleksining garmonik tebranish chastotalari va intensivliklari

Chastota

49.4	2.4
74.9	0.56
209.3	13
233.2	23
2127.2	56
3051.9	162

Intensivlik

Kvanto-ximik hisoblashlar natijalari ma'lum xatoliklar hisobga olinganda tajriba natijalariga mos keladi.

XULOSA

1. Molekulalararo o'zaro ta'sir hamda H-bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrini o'rganishga bag'ishlangan adabiyotlar bilan tanishildi.
2. Kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslarning tebranish spektrlari hamda olingan tajribalar asosida molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlari va ularning spektral parametrlari o'rganildi.
3. Ikki atomli vodorod-xlorid molekulasining tebranma-aylanma spektri hamda past temperaturaga inert erituvchilardagi IQ yutilish spektrlari tahlil qilindi.
4. Vodorod xlorid molekulasining azot va uglerod oksidi bilan hosil qilgan komplekslarning tebranish spektrlari tahlil qilindi.
5. Gaussian- 09 programmasi asosida $\text{HC}+\text{N}_2$ va $\text{HCl} + \text{CO}$ komplekslarining spektral parametrlari shuningdek komplekslarning geometriyasi, atomlarda zaryadlar taqsimoti va bog'lanish energiyalari aniqlandi.
6. Adabiyotlardan olingan tajriba natijalari va kvanto-ximik hisoblashlarga asoslanib o'rganilgan, komplekslarni kuchsiz vodorod bog'lanishli komplekslar deb qarash mumkin.

FOYDALANGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. М.В.Валькенштейн. Строение и физические свойства молекул. –Москва, Ленинград, 1955, -638 С.
2. Н.Д.Соколов. Водородная связь. Успехи физических наук. 1955, Т. LVII, вып 2. С. 205-278.
3. G.C.Pimentel, A.L. McClellan. The Hydrogen Bond, Freeman: San Francisco, 1960. p. 195.
4. Дж.Пиментал, О.Мак-Келан, Водородная связь. М.: Мир. 1964. С.462.
5. Н.Г.Бахшиев, Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий. -Л. Изд. Наука. 1972. -265 С.
6. А.Н.Матвеев. Молекулярная физика. - М., Высшая школа, 1981.
7. Н.Д.Соколов. Водородная связь. М.: Наука, 1981, -287 С.
8. И.Г.Каплан. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – Москва: Наука, 1982, -312 С.
9. М.И.Шахпаронов, Межмолекулярные взаимодействия. М.:Знание, 1983.64с.
10. П.Кэри. Применение спектроскопии КР и РКР в биохимии. Пер. англ.; под ред. Б.В. Локшина. М.: Мир, 1985. -272 С.
11. M.J.Frish, M.Head-Gordon, J.A.Pople. Direct analytic SCF second derivatives and electric field properties // J. Chem. Phys. 1990, 141, pp. 189-196.
12. Ф.Х.Тухватуллин, А.Қ.Атаходжаев, А.Жумабаев, У.Н.Ташкенбаев, Г.Муродов. Журн. Прикл. спектр. Т. 56, № 6, (1991), С. 10.
13. G.P Xomchenko „ Kimyo” Toshkent 1992 у.
14. В.В.Преждо, И.П.Крайнов. Межмолекулярные взаимодействия и электрические свойства молекул. - Харков, 1994, -239 С.
15. H.Rustamov. Fizika kimyo. Toshkent. “O’zbekiston” 2000 yil
16. R.E.Asfin, G.S.Denisov, K.G.Tokhadze, J.Mol. Struct. 608, 161 (2002).
17. Р.Э.Асфин, Г.С.Денисов, З.Мильке, К.Г.Тохадзе, Оптика и спектр. 99, 62 (2005).

18. В.П.Булычев, Е.И.Громова, К.Г.Тохадзе, Экспериментальное и теоретическое исследование структуры полосы поглощения v(HF) в комплексе H₂O...НГ\ Оптика и спектроскопия 2004.
19. Л.М.Собиров, Б.С.Жураев. Молекуляр оптика, Самарканد, 2009.
20. K.G.Toxadze , G'.Murodov, M.Axrоров, G.Nurmurodova. Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari. Qarshi, 2012. B.201-203.
21. G'.Murodov, Z.Mamatov, M.Axrоров, G.Nurmurodova. Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari. Qarshi, 2012. B.218-220.
22. O.Jalilov, G.Nurmurodova. “ Fizika fanining rivojida iste'dodli yoshlarning o'rni” mavzusidagi Respublika ilmiy – amaliy konferensiyasi. Toshkent 2013. B.126-128.
23. Г.Муродов, К.Г.Тохадзе, Х.А.Хушвактов, А.Шодиев, Г.Нурмуродова. “IV Международная конференция” Самарканд. 2013. Б.14.
24. О.Дж. Жалилов, М.Н. Абилов, Г. Нурмуродова, М. Шарипова «Tabiiy-ilmiy fanlardan mashg'ulotlar o'tishda informatsion texnologiyalarning qo'llanilishi» mavzusidagi ilmiy-uslubiy anjumanining maqolalar to'plami. Samarqand sh. 2014. B.102-103.
25. В.П.Булычев, К.Г.Тохадзе, Г.Мурадов, Б.Т.Куйлиев. Исследование межмолекулярных взаимодействий и водородной связи в газовой фазе Возможности и перспективы. UZB. J. of. Physics. V. 16. N2 2014 p. 153-158.
- 26.P.E.Асфин. Инфракрасные спектры систем с сильной водородной связью в конденсирлванных фазах. Фосфиновые кислоты. UZB. J. of. Physics. V. 16. N2 2014 p. 82 – 85.
- 27.G'.Murodov, O.J.Jalilov, G.E.Nurmurodova, M.N.Abilov, M.Sharipova. “Kondensatlangan muhitlar fizikasi va materialshunoslikning dolzarb masalalari” Respublika ilmiy-texnikaviy anjumani materiallari. 2014. B.14-15.
28. K.G.Toxadze, G'.Murodov, H.Xushvaqtov, H.Jumanov, Q.Xudaynazarov, G.Nurmurodova. “ Zamонавиј fizika va astrofizikaning dolzarb muammolari” mavzusidagi ilmiy – amaliy anjumani. Qarshi, 2015. B.1-3.

- 29.G'.Murodov, M.N.Abilov, G. E.Nurmurodova. “Fizika fanining rivojida iste'dodli yoshlarning o'rni” Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari Toshkent, 2015. 24-25.
30. G'.Murodov, H.Xushvaqtov. “Spektroskopiya asoslari” Toshkent “Voris” 2015.
31. G.Nurmurodova. “Jamiyatni modernizatsiyalash va hayot farovonligini oshirishda olimalarning o'rni” mavzusidagi olimalar va iqtidorli talabalarning Respublika ilmiy – amaliy anjumani. Samarqand, 2015. B.47 – 48.
32. I.Doroshenko, O.Lizengevych, V.E.Pogorelov, L.Savransky // Ukr.J.Phys, 49 (2004). P540-544.
33. V.Pogorelov, L.Bulavin, O.Lizengevich, I.Doroshenko, L.Savranskij, A.Veretennikov, L.Berezovchuk. Vibrational spectroscopy of partially ordered condensed substances // III Международная конференция по молекулярной спектроскопии. Самарканд, 2006 г. С. 4.
34. F.H.Tukhvatullin, V.E.Pogorelov, Jumabaev A., Hushvaktov H.A., Absanov A.A., Shaymanov A. Aggregation of molecules in liquid methyl alcohol and its solutions. Raman spectra and *ab initio* calculations // Journal of Molecular Structure, Volume 881, Issues 1-3, 2008, P. 52-56
35. М.Н.Абилов, Г.Нурмуродова, Б.Худойкулов, Н.Сирожова. «Magistrantlarning XV ilmiy koferensiyasi» materiallari. Samarqand, 2015. B. 89-
36. G.Nurmurodova, A.Ibragimov. “Molekulalar spektral parametrlarining molekulalararo o'zaro ta'siri tufayli o'zgarishi” «Magistrantlarning XVI ilmiy koferensiyasi» materiallari. Samarqand, 2016.
37. К.С.Тохадзе, А.Аманов, Г.Муродов, Г.Нурмуродова. «Исследование формы колебательных полос галоидводородов в комплексах с водородной связью», «Актуальные проблемы современной физики » Международной конференции, Таджикистан. 18 апреля 2018 года. Стр.18-20
38. www.ziyonet.uz
39. www.physics.web.org
40. www.ufn.ru

