

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕСС КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В ЭТАНОЛЕ

Б.Т.Куйлиев¹, И.Ю. Дорошенко², А.А.Некбоев¹, Л.О.Мейлиев¹, Р.Хамроева¹¹Каршинский государственный университет,²Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко.

Аннотация. Исследовано процесс кластерообразования в этаноле с учетом существования двух конформационных форм его молекулы.

Ключевые слова: кластер, аргоновой матрице, спектральные полосы, поглощения, моделирования, валентная колебания, деформационные колебания, водородной связь.

В работе исследовались процесс кластерообразования в этаноле с учетом существования двух конформационных форм его молекулы. Такие жидкости как этанол играют чрезвычайно важную роль в протекании многих природных процессов, в первую очередь физиологических процессов в живых организмах. Основную роль в таких процессах играют структурные особенности этих жидкостей. Поэтому изучение влияния конформационной структуры на образовании молекулярных кластеров является актуальной задачей не только современной молекулярной физики, но и смежных областей – биофизики, биохимии, физиологии и т.п.

Для проведения анализа конформационного состава кластеров этанола использовались экспериментально зарегистрированные спектры инфракрасного поглощения этанола, изолированного в низкотемпературной аргоновой матрице. Спектры записывались с помощью Фурье-спектрометра IFS-113 производства компании Bruker.

При помощи программного пакета для квантово-химического моделирования Gaussian 03 [1] методом DFT в приближении B3LYP/cc-pVTZ были проведены квантово-химические расчеты оптимальной геометрической структуры транс- и гош-конформеров этанола.

На рис.1. показан экспериментально зарегистрированный спектр ИК поглощения жидкого этанола [2]. В низкочастотной области спектра ($500 - 1500 \text{ см}^{-1}$) проявляются валентные колебания C – C и C – O связей, а также деформационные C – H колебания. Область $2800 - 3000 \text{ см}^{-1}$ соответствует валентным C – H колебаниям, а широкая полоса с максимумом на 3300 см^{-1} - валентным O – H колебаниям.

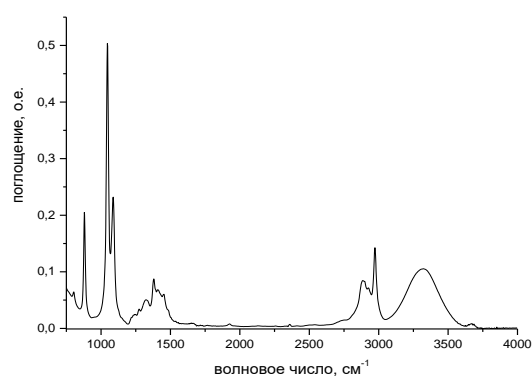


Рис. 1. Спектр ИК поглощения жидкого этанола

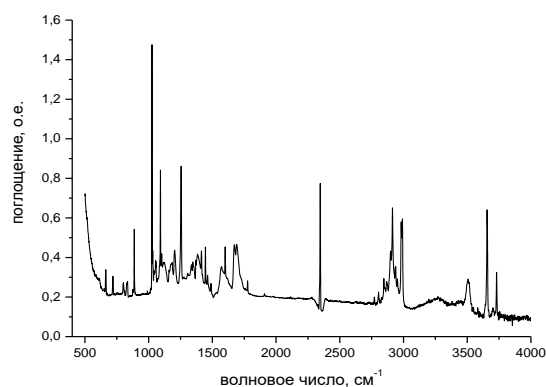


Рис. 2. Спектр ИК поглощения этанола, изолированного в аргоновой матрице при температуре 20 К

В результате сильного межмолекулярного взаимодействия в жидком этаноле, все спектральные полосы сильно уширены, что значительно усложняет их интерпретацию с точки зрения определения конформационного состава. Особенно это касается наиболее интересной для нас полосы валентных O – H колебаний. Эта полоса имеет очень большую ширину и

смещена в низкочастотную область, что свидетельствует о формировании водородно-связанных кластеров в жидком этаноле.

Проведены квантово-химические расчеты оптимальной геометрии, потенциальной энергии и колебательных спектров транс- и гош-конформеров молекулы этанола. Показано, что транс-конформер является более энергетически выгодным – его потенциальная энергия на 0,3 кДж/моль меньше, чем энергия гош-конформера.

Результаты квантово-химического моделирования использованы для интерпретации экспериментально зарегистрированных спектров ИК поглощения этанола, изолированного в низкотемпературной аргоновой матрице. На основании сравнения интенсивностей полос поглощения валентных ОН колебаний сделан вывод о том, что в исследуемых образцах преобладают транс-конформеры этанола.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery Jr, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, and others, Inc., Pittsburgh, PA 12478 (2003).
2. I. Doroshenko, V. Pogorelov, V. Sablinskas. Infrared absorption spectra of monohydric alcohols // Dataset Papers in Chemistry. – 2013. - V. 2013. – P. 329406.
3. Б.Т. Куйлиев. Спектры спонтанного комбинационного рассеяния низкомолекулярных углеводов // Издательско-полиграфический творческий дом имени Чулпана, Ташкент – 2018.

$Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ YUPQA QATLAMLARINING STRUKTURAVIY HOSSALARI

T. M. Razikov, Q. M. Qo'chqarov, D.Z. Isaqov, M. Mahmudov, M.P. Pirimmetov, A. Olimov
O'zR FA Fizika-texnika instituti

Annotatsiya. Vakuum termik bug'latish usuli bilan Sb_2S_3 va Sb_2Se_3 ikkilik birikmalarning kukunlaridan foydalanilgan holda yuqori sifatli kristallikka ega bo'lgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlari $300^\circ C$ taglik haroratida o'stirilgan. Rengen spektroskopiyasi natijalari tahlili, turli $S/(S+Se)$ atomar ulushida o'stirilgan $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$ yupqa qatlamlar yuqori sifatli polikristall ortorombik strukturaga ega ekanligini ko'rsatdi.

Kalit so'zlar: Sb_2Se_3 , Sb_2S_3 , $Sb_2(S_x,Se_{1-x})_3$, qattiq qorishma, Rengen spektroskopiyasi, yupqa qatlam.

Bugungi kunda dunyo ilmiy tadqiqotchilar tomonidan halkogenidli surma binar birikmalar Sb_2Se_3 , Sb_2S_3 , va ular asosidagi qattiq qorishma $Sb_2(S_x,Se_{1-x})_3$ (kimyoviy formulasi - Sb_2X_3) yupqa qatlamlarini quyosh elementlarining yutuvchi qatlami sifatida ishlatilishiga katta e'tibor berilmoqda. Sababi shundaki, ushbu materiallarning fizik xususiyatlari; p- tip o'tkazuvchanligi, taqiqlangan sohasini $E_g=1,1$ dan $E_g=1,8eV$ gacha o'zgartirish mumkinligi, yuqori yutilish koeffitsientiga teng ekanligi $\alpha > 10^5 cm^{-1}$ (quyosh radiatsiyasining ko'zga ko'rinuvchan sohasida), erish harorati pastligi (Sb_2Se_3-823K , Sb_2S_3-885K) va yuqori bug' bosimiga egaligi) $Cu(In,Ga)(Se,S)_2$ hossalriga juda yaqin [1,2]. Bundan tashqari ushbu materialga kiruvchi elementlarning arzonligi, zararli emasligi, va tashqi muhitga barqarorligidir.