

**XINOLIN MOLEKULASINING TEBRANMA HARAKAT QONUNIYATLARINI
YORUG‘LIKNING KOMBINATSION SOCHILISH VA INFRAQIZIL YUTILISH
SPEKTRLARIDA NAMOYON BO‘LISHI****Sh.H.Allaquliyeva¹, Sh.Otajonov¹, F.O. Mannonova¹****¹ Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti**

Annotsiya. Ko‘p atomli C_9H_7N – xinolin molekulasining tebranma spektri keng chastotalar oralig‘ida yorug‘likning kombinatsion sochilish va infraqizil yutilish usuli bilan tadqiq qilindi. Tajriba asosida aniqlangan yorug‘likning kombinatsion sochilish spektri yordamida H-bog‘lanishi kuzatiladigan moddalarda ushbu bog‘lanishning yashash vaqti, energiyasi hamda molekulaning tebranish chastotasini xarakterlovchi vaqt aniqlandi va ularni nazariy yo‘l bilan hisoblash metodikasi tavsiya qilindi. Ushbu spektrlarning namoyon bo‘lishi molekulalarning qutblanuvchanligini o‘zgarishi bilan bog‘liqligi asosida tahlil qilindi.

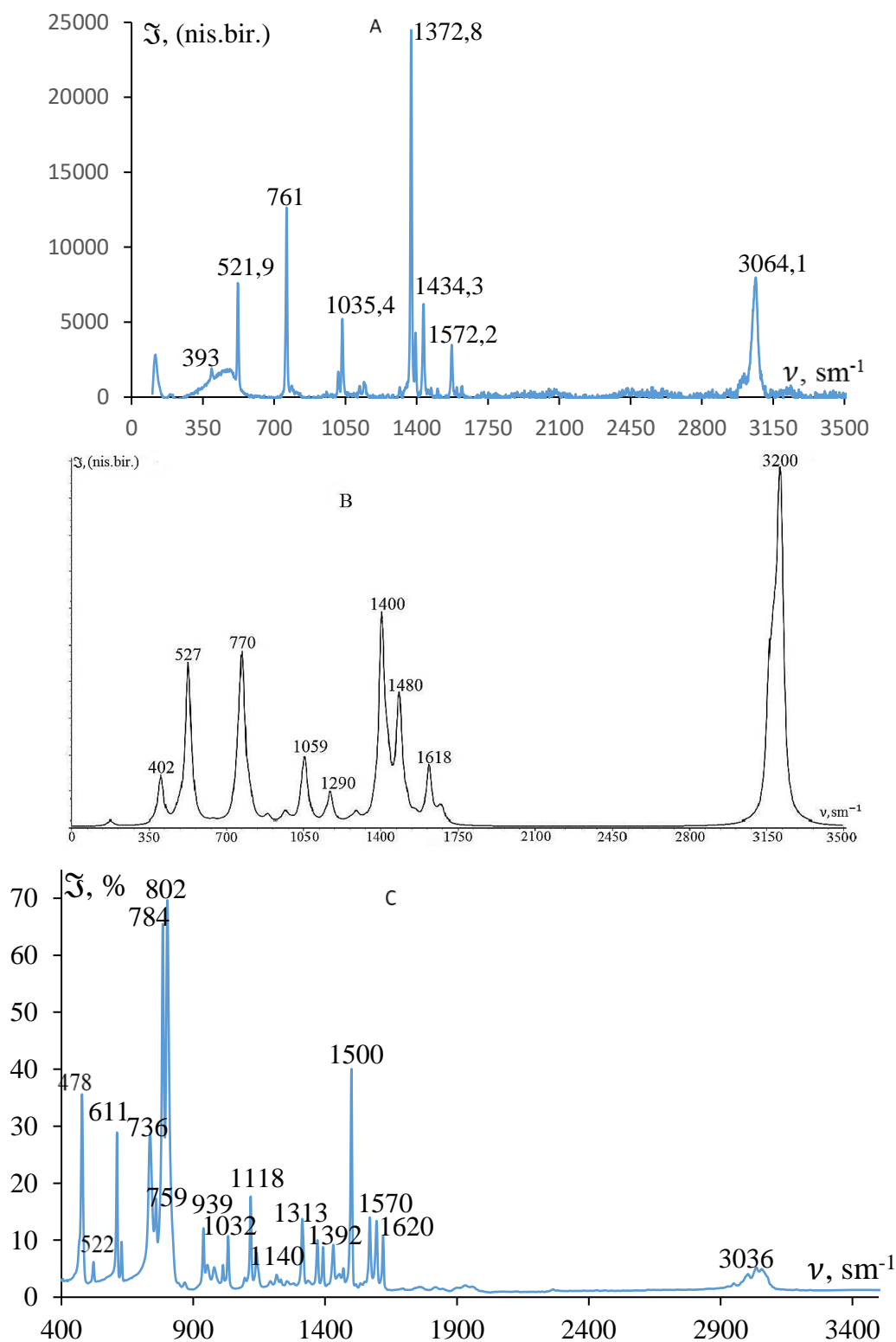
Kalit so‘zlar: spektr, kombinatsion, infraqizil, xinolin, chastota.

Hozirgi vaqtda yorug‘likning kombinatsion (YKS) va infraqizil (IQ) yutilish spektrlari molekulalar tuzilishini o‘rganish va ularni xarakterlovchi parametrlarini aniqlash uchun keng qo‘llanilmoqda. Ushbu ilmiy tadqiqot ishi xinolin – C_9H_7N molekulasining tebranma harakati bilan bog‘liq bo‘lgan optik spektrlarning namoyon bo‘lish qonuniyatlarini YKS va IQ yutilish spektrlari yordamida tadqiq qilishga hamda bu spektrlar yordamida relaksatsion jarayonlarning mikro va makro parametrlarini aniqlashdan iborat.

YKS spektri “Renishaw” kompaniyasining InVia Raman spektrometrida (o‘zidan monoxromatik nur tarqatuvchi to‘lqin uzunligi 532 nm bo‘lgan lazerdan foydalanildi) va IQ yutilish spektri Spectrum Two FT-IR (PerkinElmer) spektrometrida qayd qilingan. 1-rasmda xinolin molekulasi uchun chastotaning 0-3500 cm^{-1} diapozondagi KS va 4000-400 cm^{-1} diapozondagi IQ yutilish spektrlarining umumiy ko‘rinishi berilgan. YKS va IQ spektroskopiya bir-birini to‘ldiradigan metod hisoblanadi. Atom bog‘lanishlarining tebranishlari xar ikkala spektrda ham kuzatiladi, lekin bu spektrlar intensivliklari bilan farq qiladi.

1-rasmdagi xinolin molekulasi uchun kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan YKS spektrida 527, 770, 1400 cm^{-1} chastotali spektral chiziqlarga eksperimentdan olingan YKS spektrida 521,9, 761, 1372,8 cm^{-1} chastotali spektral chiziqlar mos tushar ekan. Demak, xinolin molekulasining aylanma-tebranma harakatidan hosil bo‘lgan YKS spektrining eksperimentdan olingan va kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan qiymatlari eksperimental xatolik doirasida bir-biriga mos tushadi deyish mumkin. Yuqori chastotalar oralig‘ida eksperimentdan olingan spektr bilan nazariy hisoblangan chastotalarning joylashish taqsimotining oshishi kuzatildi. Bu esa suyuq muhitlarning xususiy tebranish chastotalarini nazariy hisoblashlar orqali oldindan topish hamda YKS spektrini chastota bo‘yicha taqsimotini eksperimental tajriba o‘tkazishdan oldin aniqlash imkoniyatini beradi.

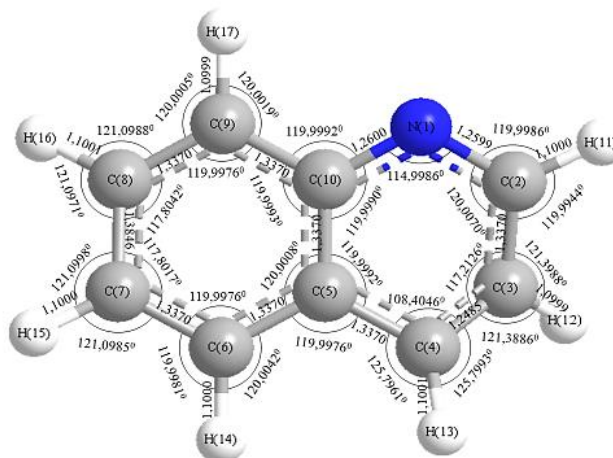
Xinolin molekulasi uchun tajribada aniqlangan YKS spektri asosida kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borilib, molekulaning fazoviy tuzilishi HF/6 – 31G Hartri-Fok usuli yordamida kompyuterda modellashtirilib, atomlarning bog‘lanish uzunliklari (angstromda, A) va ular orasidagi fazoviy burchaklar aniqlandi (2-rasm).



1-rasm. Xinolin molekulasini uchun: A-eksperimentdan olingan YKS spektri, B- kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan YKS spektri, C – eksperimentdan olingan IQ spektri

Xinolin molekulasining tebranma harakati bilan bog‘liq qonuniyatlarini hamda spektrlarning namoyon bo‘lish mexanizmlari to‘g‘risida tegishli ma’lumotlar olishda molekulaning faollashuv energiyasi qiymatini bilish katta ahamiyatga ega. Bu energiya kattaligini aniqlashning bir nechta usuli mavjud bo‘lib, kvant-kimyoviy hisoblashlarga asoslangan yarim emperik metod bilan hisoblash

mumkin [1, 2]. Uning qiymati $U = 73,5$ kal/mol ga teng ekanligi aniklandi. Y.I.Frenkel nazariyasini qo'llash asosida [3] H-bog'lanishning yashash vaqti $\tau = \tau_0 \exp(U/kT)$ tenglamadan nazariy hisoblandi (1-jadval). $\tau_0 = \frac{1}{2\pi\nu c}$ ga teng bo'lib, molekulaning tebranish chastotasini xarakterlovchi vaqt, ν – molekulaning tebranish chastotasi (1.A-rasmdagi YKS spektriga tegishli intensivlikning maksimal qiymatiga to'g'ri kelgan chastota).



2-rasm. Xinolin molekulasida kvant-kimyoviy hisoblashlarga asoslangan strukturadagi atomlarning bog'lanish uzunligi va ular orasidagi burchaklar

1-jadval

| ν, cm^{-1} | $\tau_0 \cdot 10^{14}, \text{s}$ | $U, \text{kal/mol}$ | $\tau \cdot 10^{14}, \text{s}$ |
|-----------------------|----------------------------------|---------------------|--------------------------------|
| 393 | 1,3 | 73,5 | 1,46 |
| 522 | 1,01 | | 1,13 |
| 1035 | 0,5 | | 0,56 |
| 1373 | 0,38 | | 0,42 |
| 1433 | 0,37 | | 0,41 |
| 1572 | 0,33 | | 0,37 |
| 3062 | 0,17 | | 0,19 |

Ko'p atomli molekullardagi tebranma spektrlarning namoyon bo'lish qonuniyatini tahlil qilish murakkab hisoblanadi. Chunki, atomlar bir vaqtning o'zida bir nechta tebranishlarda ishtirok etadi. Tebranma erkinlik darajalari miqdori molekulaning xususiy tebranishlar soniga teng bo'ladi. Ushbu har bir xususiy tebranishlar o'zining xususiy chastotasiga ega. Yutilish esa ma'lum bir chastotalar oralig'ida sodir bo'lib, IQ spektrlarni hosil qiladi. IQ spektrlarning qonuniyatlariga qarab, valent tebranishda molekulaning tebranishlari atomlarining bog'lanish yo'nalishi bo'yicha atomlar orasidagi masofani o'zgarishiga olib keladi. Deformatsion tebranishda esa atomlar orasidagi masofa o'zgarib bo'lib, atomlar orasidagi burchaklarni o'zgarishiga sabab bo'ladi. 1-rasmdagi YKS va IQ spektrlar xinolin molekulasidagi C-H bog'lanishga tegishli deformatsion tebranishlarning chastotalari bir-biridan farq qiladi. Masalan, YKS spektridagi chastotaning $521,9 \text{ cm}^{-1}$ qiymatga to'g'ri kelgan spektr IQ spektrda 522 cm^{-1} ga teng bo'lib, $0,1 \text{ cm}^{-1}$ qiymatga siljigan yoki 761 cm^{-1} qiymatga to'g'ri kelgan spektr IQ spektrda 759 cm^{-1} ga teng bo'lib, 2 cm^{-1} qiymatga siljigan. YKS va IQ spektrlardagi ushbu farq kichik bo'lganligi sababli C-H bog'lanishlar bir jinsli hamda barqaror qonuniyatga ega degan xulosaga kelish mumkin. Spektrlarning intensivliklari esa bir-biridan keskin farq qilib, YKS

spektr intensivligi IQ spektridan bir necha barobar katta qiymatni qabul qiladi. Demak, YKS spektr faol bo‘lib, molekulaning qutblanuvchanligi o‘zgarishi bilan bog‘liq.

Xulosa o‘rnida aytish lozimki, suyuq muhitlarning xususiy tebranish chastotalarini nazariy hisoblashlar orqali oldindan aniqlashning istiqbolli usuli ishlab chiqildi. Kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida aniqlanadigan molekulyar parametrlarning qiymatlarini modellashtirish orqali, ishlab-chiqarish uchun zarur bo‘lgan moddalarni sintez qilishga tavsiyalar berish imkonini beradi.

Ushbu ilmiy tadqiqot ishi O‘zbekiston Respublikasi Oliy ta‘lim, fan va innovatsiyalar vazirligi tomonidan FZ-20200929385 “Biologik obektlarning nanoo‘lchamli molekulyar klasterlarini o‘rganish va tatbiq qilishning spektroskopik hamda noemperik tahlil usullarini ishlab chiqish” mavzusi bo‘yicha moliyalashtirilgan fundamental loyiha doirasida bajarildi.

Adabiyotlar

1. Aston J., Isserow S., Szasz G., Kennedy R. Empirical correlation and method of calculation of barriers hindering internal rotation // Journal of Chemical Physics, 1944, Vol.12, p.336-344.
2. Magnasco V. An empirical method for calculating barriers to internal rotation in simple molecules // Nuovo Cimento, May 1962, Vol.24, Iss.3, p.425-441.
3. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Москва: Издательство АН СССР, 1945

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ПЕРЕНОСА СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В АТМОСФЕРЕ, ОТРАЖЕННОГО ОТ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕМЛИ

Собиров М.М., Рузибоев В. У., Камолова М.М.

Аннотация. Разработан метод расчета диффузного потока солнечного излучения, отраженного от поверхности Земли в случае, когда отражение происходит в соответствии с законом Ламберта. Расчеты интенсивности диффузного излучения проводились в рамках теории S, T -матрицы Чандрасекара, а аналитический вид X, Y -функций определялись методом факторизации.

Ключевые слова, рассеяния света, солнечный спектр, перенос излучения, оптическая толщина, альbedo поверхности Земли.

В работах [1,2] были исследованы спектральные и угловые распределения интенсивности потоков диффузно отраженного и прошедшего солнечного излучения из слоев атмосферы, которые формируются вследствие многократного рэлеевского рассеяния на молекулах воздуха. Были выполнены расчеты спектрального распределения полных потоков диффузно отраженного, прошедшего и нерассеянного солнечного излучения, выходящего из слоев атмосферы. Кроме упомянутых трех потоков, влияние на поле солнечного излучения в атмосфере оказывает поток излучения, отраженного от поверхности Земли.

Отраженный поток возвращается обратно в атмосферу, и наблюдается вторичный перенос первично падающего солнечного излучения, что приводит к изменению поля излучения в атмосфере. Вклад этого дополнительного потока в поле излучения атмосферы был впервые рассчитан в классических работах Чандрасекара [3] и другими учёными. Потребность в проведении такого расчета возникла для оценки влияния отражения солнечного излучения от поверхности Земли на освещенность гелиотехнических установок [1,2,4], так как методика расчета этого потока не приводится в литературе.

Основные уравнения

Рассматривается модель чистой, консервативной рэлеевской атмосферы, в которой