ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ
ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

ЭШЧАНОВ БАХОДИР ХУДАЙБЕРГАНОВИЧ

КОНДЕНСИРЛАНГАН МУҲИТЛАРДАГИ МОЛЕКУЛАЛАРАРО ТАЪСИРЛАШУВ СПЕКТРОСКОПИЯСИ ВА РЕЛАКСАЦИОН ЖАРАЁНЛАР КИНЕТИКАСИ

01.04.05 – Оптика

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

ТОШКЕНТ – 2018

УДК: 535.012; 535.58; 537.9; 539.22; 539.63

Докторлик (DSc) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата докторской (DSc) диссертации

Contents of the Doctoral (DSc) Dissertation Abstract

Эшчанов Баходир Худайберганович
Конденсирланган муҳитлардаги молекулалараро таъсирлашув спектроскопияси ва релаксацион жараёнлар кинетикаси..... 3

Эшчанов Баходир Худайберганович
Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах и кинетика релаксационных процессов..... 27

Eshchanov Bakhodir Khudayberganovich
Spectroscopy of intermolecular interactions in condensed matters and kinetics of relaxation processes 51

Эълон қилинган ишлар рўйхати
Список опубликованных работ
List of published works..... 55

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

ЭШЧАНОВ БАХОДИР ХУДАЙБЕРГАНОВИЧ

КОНДЕНСИРЛАНГАН МУҲИТЛАРДАГИ МОЛЕКУЛАЛАРАРО ТАЪСИРЛАШУВ СПЕКТРОСКОПИЯСИ ВА РЕЛАКСАЦИОН ЖАРЁНЛАР КИНЕТИКАСИ

01.04.05 – Оптика

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc) ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

ТОШКЕНТ – 2018

Докторлик (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2017.1.DSc/FM29 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (http://iplt.uz) ҳамда «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида (www.ziyonet.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслаҳатчи: **Отажонов Шавкат**
физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар: **Ташкенбаев Улуғбек Неъматович**
физика-математика фанлари доктори, профессор

Дорошенко Ирина Юрьевна
физика-математика фанлари доктори (Украина)

Нематов Шерзод Каландарович
физика-математика фанлари доктори

Етакчи ташкилот: **Самарқанд давлат университети**

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2018 йил «26» 10 соат 14⁰⁰ даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (5 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-32-54.

Диссертация автореферати 2018 йил «10» _____ куни тарқатилди.

(2018 йил «10» 10 даги 5 рақамли реестр баённомаси).

Х.Б.Ашуров
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш раиси,
ф.-м.ф.д., катта илмий ходим

Д.Т.Усманов
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш илмий котиби,
ф.-м.ф.д., катта илмий ходим

Б.Е.Умирзаков
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш
қошидаги илмий семинар раиси
ф.-м.ф.д., профессор

КИРИШ (докторлик (DSc) диссертациясининг аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳон миқёсида олиб борилаётган кўплаб илмий-амалий тадқиқотлар конденсирланган муҳитлардаги молекулалараро таъсирлашув кучини ва уларнинг табиатини тадқиқ қилиш долзарб эканлигини кўрсатмоқда. Табиати турлича бўлган кўпатомли мураккаб молекулалардан ташкил топган муҳитлардаги ўзаро таъсирлашув динамикасининг умумий қонуниятларини конденсирланган муҳитлар замонавий спектроскопияси ёрдамида ўрганиш асосий тадқиқот йўналишларидан бири эканлигини таъкидлаш лозим. Молекулалараро таъсирлашув конденсирланган муҳитлардаги турли фотофизикавий жараёнларни боришига жиддий таъсир кўрсатади, жумладан, уйғониш энергиясини молекулалараро ўтиш жараёнида, конденсирланган муҳитларнинг физик-кимёвий хоссалари шаклланишида иштирок этади.

Жаҳонда олиб борилаётган тадқиқотларнинг кўрсатишича, суюқликлардаги релаксацион жараёнларни ўрганишда оптик спектроскопия муҳим ўрин эгаллайди. Ёруғликнинг молекуляр сочилиш спектроскопияси, айниқса, унинг ноқутбланган (анизотроп) компоненталари ҳамда ёруғликнинг комбинацион сочилиши спектроскопияси бошқа оптик усулларга нисбатан юқори афзалликларга эга. Модданинг суюқ ҳолати бўйича мукаммал назариянинг яратилиши суюқлик структураси тўғрисида ва унга молекулаларнинг иссиқлик ҳаракати таъсири тўғрисида ишонарли маълумотлар олиш имконини яратади. Суюқликлардаги молекулаларнинг иссиқлик ҳаракати уларнинг асосий физикавий хоссаларини ва макроскопик характеристикасини белгилаб беради. Унинг тавсифи яратилган бир қатор назарий моделларга асосланади, бироқ бу моделлар мукаммалликдан йироқ бўлиб, улар кўпатомли бирикмаларга қўлланилганда кўпгина характеристикаларни ҳисоблаш имконини бермайди. Мавжуд тажриба натижалари ҳам зиддиятли ва тўлиқ эмас.

Республикамизнинг илм-фан ривожида амалий татбиққа эга бўлган долзарб йўналишларга жуда катта эътибор қаратилмоқда, хусусан, ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиши бўйича бой тажриба натижалари тўпланган, уларнинг шаклланиш жараёнларининг асосий қонуниятлари топилган. Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси[1]да «принципиал жиҳатдан янги маҳсулот ва технология турларини ўзлаштириш, шу асосда ички ва ташқи бозорларда миллий товарларнинг рақобатбардошлигини таъминлаш» бўйича ишлар олиб борилиши кўрсатиб ўтилган. Бу борада кучли флуктуацияланувчи муҳитларда мукаммал молекуляр назарияни яратиш ва мақсадли хоссаларга эга янги материалларни олиш ҳамда уларнинг ишлаб чиқаришга жорий этилиши муҳим аҳамият касб этади.

[1] 2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси / Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли Фармонига 1-илова, п. 3.2.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ–4997-сонли «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармонини, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ–2789-сон «Фанлар академияси фаолияти, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналиши доирасида бажарилган.

Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий тадқиқотлар шарҳи[2].

Конденсирланган муҳитларнинг молекулалараро таъсирлашув спектроскопияси ва физикаси соҳасида дунёнинг етакчи илмий марказлари ва олий таълим муассасаларида, жумладан: University of California (АҚШ), University of Nevada (АҚШ), Ohio State University (АҚШ), Columbia University (АҚШ), Colorado State University (АҚШ), Johannes Gutenberg University (Германия), University of Munchen (Германия), University of Bayreuth (Германия), University of Kent (Англия), University of Uppsala (Швеция), University of Tokyo (Япония), Gakushuin University (Япония), Tokay University (Япония), П.Н. Лебедев номидаги физика институтида (Россия), Санкт – Петербург Физика институти (Россия), Уфа давлат университети (Россия), Киев университети (Украина), Белоруссия давлат университети (Белорусия), Кемерово давлат педагогика институтида (Россия), Ион-плазма ва лазер технологиялари институти (Ўзбекистон), Ўзбекистон Миллий университети, Самарқанд давлат университети (Ўзбекистон)да фундаментал ва амалий тадқиқотлар олиб борилмоқда.

Конденсирланган муҳитлар, шу жумладан, суюқликлар ва эритмаларни тадқиқ қилишда дунё миқёсида бир қатор долзарб муаммолар ҳал қилинган ва қуйидаги муҳим илмий натижалар олинган: эритмадаги концентрациянинг флуктуацияси билан суюқлик зичлиги ўртасидаги вақтга боғлиқлик назарияси ишлаб чиқилган; суюқликларда ёруғликнинг сочилишини молекулаларнинг айланма-броун ҳаракати каби талқин қилган (Физика-техника институти, Россия); молекулаларнинг макроскопик назарияси асосида ҳисоблаб топилиши мумкин бўлган бир нечта мословчи параметрли содда гидродинамик модель яратилган; гидродинамик модель орқали ёруғлик молекуляр сочилишини молекулаларнинг қайта ориентацияси сабабли ҳосил бўлиши аниқланган (Калифорния университети, АҚШ); чизиқли молекулалар

[2]Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.journals.aip.org, www.osapublishing.org, www.iop.org, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.opticsinfobase.org, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcorolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu, www.uni-wuppertal.de, www.msu.ru, www.ufn.ru, www.upmc.fr, www.opticjourn.ifmo.ru ва бошқа манбалар асосида ишлаб чиқилган.

учун ёруғлик сочилишининг микроскопик назарияси ишлаб чиқилган (Иоганн Гутенберг университети, Германия); суюқликлардаги яқин тартибли кучли молекулалараро таъсирлашувлар ориентация корреляциясининг радиусини ва энг яқин қўшни молекулалар ўртасидаги ҳолатнинг ўзгаришига олиб келиши аниқланган (Невада университети, АҚШ).

Ҳозирги вақтда жаҳонда конденсирланган муҳитлардаги молекулалараро таъсирлашув кучини ва уларнинг табиатини ёруғликнинг сочилиши орқали таҳлили борасида қатор, жумладан, қуйидаги устувор йўналишларда илмий тадқиқотлар олиб борилмоқда: моддаларнинг струкурасини ва фазовий ўтишларнинг ёруғлик молекуляр сочилиш спектрлари орқали аниқлаш; рэлей чизиғи қанотлари интенсивлигининг частота бўйича тақсимланиши температурага боғлиқлигини реал вақтларда юқори сезгирликда аниқловчи усулларни ишлаб чиқиш; суюқликнинг критик нуқталари яқинида флуктуацион ва структуравий ўзгаришлар ҳосил қилувчи ҳодисаларни ёруғликнинг изотроп ва анизотроп сочилиш спектроскопияси ёрдамида аниқлаш; моддаларнинг ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларидаги айланма тебранишлар частоталарини башорат қилишнинг истиқболли усулларини ишлаб чиқиш.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Ҳозирда тажрибада суюқ моддаларнинг струкурасини ва фазовий ўтишларнинг ҳароратга боғлиқлигини ўрганиш физикавий масалаларнинг долзарб соҳасини ташкил қилади.

Суюқликларда ёруғликнинг сочилиш назарияси М.Леонтович, Л.И.Мандельштам, К.А. Валиев томонидан ишлаб чиқилган. С.М. Рытов, T. Keys, D. Kivelson томонидан ишлаб чиқилган молекуляр сочилишнинг релаксацион назариясига асосан бир ва икки қисмли корреляцияларнинг релаксация вақти фарқ қилади, лекин бирламчи ўзгарувчиларнинг релаксацион флуктуацияси ягона релаксация вақти билан характерланади ва ўз навбатида, сочилиш чизиғининг контури содда дисперсион кўринишда бўлади. Авторларнинг бундай хулосалари сочилишдан ва бошқа ҳодисалардан (ядро магнит резонанс каби) топиладиган анизотропия релаксацияси вақтлари ўртасидаги фарқни тушунтириш имконини беради.

Россия Фанлар академияси мухбир аъзоси И.Л.Фабелинский раҳбарлигида тоза суюқликларда ёруғлик молекуляр сочилиш спектрлари тажрибада ўрганилди. Бу тажрибаларда, молекуляр сочилиш спектри қанотининг узвий соҳаси М.Леонтович назарияси билан талқин қилинмаслиги аниқланди. Тажрибаларда аниқланган частотанинг 8-10 $см^{-1}$ интервалдаги контурнинг синиши иккита релаксациянинг вақти мавжуд, деган хулосани беради. Қовушқоқлиги кам бўлган суюқликларнинг релаксация вақтини ўлчаш орқали, анизотроплик флуктуациясининг релаксация вақти ва суюқликдаги броун сферик заррачаларининг релаксацияси вақти, яъни релаксациянинг дебай вақти билан мос келмаслиги аниқланди.

Ўзбекистонлик олимлар, хусусан академик А.К.Атаходжаев ходимлари билан (Ф.Тухватуллин, А.Жумабоев, У.Ташкенбаев, Ф.Ганиев ва б.) суюқ фазада молекуляр динамика тадқиқотларини олиб боришди. Турли тузилишдаги суюқликларда ноқутбланган сочилиш контурлари ўлчанган ва анизотропияликнинг релаксация вақти топилган. Релаксацион назарияга мувофиқ, рэлей чизиқларини кенгайишдан ва ёруғликнинг иккиламчи синишидан топилган айланма релаксация вақтининг қийматлари солиштирилади. Тадқиқотлар натижасида молекулалараро таъсирлашув ва молекуляр даражадаги механизмларнинг характерли релаксация вақтларининг ўзига хослиги аниқланди. Профессор Л.М.Собиров (СамДУ) раҳбарлиги остида суюқликнинг критик ва махсус нуқталари яқинида флуктуацион ва структуравий ўзгаришлар ҳосил қилувчи ҳодисаларни ёруғликнинг изотроп ва анизотроп сочилиш спектроскопияси ёрдамида тажрибавий аниқлаш бўйича ишлар олиб борилмоқда. Бу тадқиқотлар натижасида бир қатор янги физикавий ҳодисалар топилган.

Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университетида профессор, ф-м.ф.д. Ш.Отажонов раҳбарлигида молекуляр спектрларни молекулалараро таъсирлашувга боғлиқлигини ўрганиш бўйича кенг қамровли систематик тадқиқотлар олиб борилмоқда. Бу тадқиқотлар бир томондан, суюқликларнинг спектроскопик хоссалари билан уларни ҳосил қилган молекулалар ўртасидаги умумий нисбатни ўрганиш, бошқа томондан – турли табиатли молекулалараро таъсирлашувнинг молекуляр спектрга миқдорий таъсирини ўрганиш билан боғлиқ. Бу тадқиқотлар натижасида тушунтирилиши керак бўлган бир қатор янги физикавий ҳодисалар топилди. Хусусан, юқори ҳароратларда суюқликларда ёруғликнинг молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси спектрининг торайиш эффекти, ёруғликнинг сочилиш интенсивлигига тушаётган ёруғлик ёруғликининг тўлқин узунлигига боғлиқлик қонунининг бузилиши, критик температурага яқин соҳаларда суюқлик молекулаларининг когерентлашиш ҳолатининг мавжудлиги кузатилди. Ёруғликнинг молекуляр сочилиш контурлари параметрларининг ҳароратга боғлиқлиги бўйича тажриба натижаларининг мутаносиблиги асосида суюқлик молекулаларининг иссиқлик ҳаракати модели таклиф этилган.

Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган олий таълим муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Ўзбекистон Миллий университети илмий-тадқиқот режаларининг №15-198 RG/PHYS/AS_I – FR3240287086 “Experimental study of relaxation processes in anisotropic liquids: Analysis of oscillation and orientation spectra” мавзуидаги Халқаро фанлар академиясининг (2015-2017), №16G14 “Study on molecular spectroscopy using lasers” мавзуидаги Япониянинг Матсумае халқаро фондининг (сентябрь – октябрь 2017 йил) халқаро илмий лойиҳалари ҳамда университетнинг “Оптик усулларда конденсирланган муҳитларнинг релаксацион жараёнларини ҳароратга боғлиқлиги” мавзуидаги тадқиқотлари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади метил ва галоид бирикмалар киритилган ароматик углеводородларда структуравий ўзгаришларни аниқлаш ва таҳлил қилишнинг оптик усулларини ривожлантириш ҳамда молекулалараро таъсирлашувнинг нурланиш спектрида намоён бўладиган релаксацион жараёнларининг физикавий механизмларини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

температура ва частотанинг кенг интервалларида ёруғликнинг сочилиши бўйича тадқиқотлар ўтказиш имконини берадиган сезгирлиги юқори бўлган автоматлашган комплекс тажриба қурилмаларини яратиш;

хона температураси билан критик температура оралиғида турли симметрияга эга бўлган молекулалардан ташкил топган суюқликларда ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиш спектрларини ўрганиш;

суюқлик молекулаларининг иссиқлик ҳаракатини тавсифлашда ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиш контурининг ҳосил бўлишидаги турли механизмларни аниқлаш ва уларнинг улушини баҳолаш;

тебранма ва ориентацион релаксация жараёнларига метил ва галоид бирикмаларнинг таъсирини ўрганиш;

ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиш спектрлари бўйича релаксацион жараёнларнинг параметрларини ҳисоблаш ҳамда айланма ва тебранма спектрларнинг кўп компонентли таҳлилининг услубий ва дастурий таъминотини ишлаб чиқиш;

молекулаларнинг оптимал конфигурацияларини ўрнатиш мақсадида структуравий, электрон тузилиши ва спектроскопик параметрлари бўйича квант-кимёвий ҳисоблашларни амалга ошириш.

Тадқиқотнинг объекти сифатида молекулаларнинг шакли ва қутбланиш хоссалари билан фарқланадиган, иссиқлик ва ёруғлик таъсирларига чидамли метил ва галоид бирикмалар киритилган ароматик углеводородлар танланган.

Тадқиқотнинг предмети ўрганилаётган бирикмаларда температура таъсирида борадиган флуктуацион жараёнлар динамикаси ва уларни лазер нурланишининг спектрал таркибида намоён бўладиган молекулалараро таъсирлашув жараёнларидир.

Тадқиқотнинг усуллари. Тадқиқот ишида замонавий назарий ва амалий усуллардан фойдаланилди, жумладан, ёруғликнинг молекуляр сочилиш спектроскопияси, комбинацион сочилиш спектроскопияси, молекуланинг тормозланиб ҳаракатланиш модели, квант-кимёвий ҳисоблаш усуллари, математик анализ учун амалий дастурлар пакетлари.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

углеводородлар ва уларнинг галоидалмашинган ҳосилаларида ёруғликнинг молекуляр (0-200 $см^{-1}$ соҳада) ва комбинацион (50-5000 $см^{-1}$) сочилиш спектрлари олинган;

конденсирланган муҳитлар физикасининг молекулалараро таъсирларини ва мураккаб молекулаларнинг турли фазовий ҳолатлардаги

физик-кимёвий хоссаларини очиб берувчи муҳим молекуляр параметрларни аниқлаш усули ишлаб чиқилган;

илк бор суюқликларда нейтронларнинг сочилиши бўйича спектроскопик усулнинг модификацияси асосида ёруғликнинг молекуляр сочилиш интенсивлигини динамик ҳисоблашнинг назарий усули ишлаб чиқилган;

метил ва галоид бирикмалар киритилган ароматик углеводородларда ёруғлик молекуляр сочилиши ноқутбланган қисмининг "тор" ва "кенг" таркибий контурлардан иборат бўлиши аниқланган;

модданинг "анизотроп суюқлик – изотроп суюқлик" фазовий ўтиш температураси (критик температура) яқинида ёруғликнинг анизотроп сочилиш спектри кенглигининг торайиш динамикаси Френкель назариясига мос эмаслиги исботланган;

галоидалмашинган бензолларда потенциал чуқурликларнинг қийматларини яримэмпирик ёндашув орқали ҳисоблашнинг усуллари ишлаб чиқилиб, молекулалараро таъсирлашувни инобатга олган квант-кимёвий ҳисоблашлар асосида спектрал-структуравий корреляциялар аниқланган;

молекулалар қайта ориентацияланишининг потенциал чуқурлиги температурага боғлиқлиги ва алоҳида атомлар гуруҳининг айланма тебранишлари ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари қуйи частоталарида намоён бўлиши аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари:

ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган компонентаси контурини молекулаларнинг эркинлик даражасига мос ҳолда лоренциан ва ҳар хил даражали экспоненциал функция кўринишидаги қисмларга ажратиш ҳамда унинг параметрларини (релаксация вақти, анизотропия даражаси, интеграл интенсивлик, контурларнинг оғирлиги ва б.) ҳисоблаш усули ишлаб чиқилган;

суюқликларда ёруғликнинг молекуляр сочилиш интенсивлигини динамик ҳисоблашнинг нейтронлар спектроскопияга асосланган назарий усули ишлаб чиқилган;

ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган компонентаси интеграл интенсивлигини температурага номонотон боғлиқлигининг ўзгариши аниқланган;

юқори температура ва босимга бардошли кюветалар ишлаб чиқилган ва улар суюқликларнинг критик структуравий – беқарор ҳолатлари яқинида физикавий қонуниятларни аниқлашга хизмат қилиши асосланган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги амалий натижалар тадқиқ қилишнинг замонавий усулларидан фойдаланганлиги билан асосланади, жумладан, лазер раман спектроскопия, конфокаль микроскопия, квант-кимёвий ҳисоблаш усуллари, математик анализ ва статистиканинг амалий дастурлар пакетлари.

Тадқиқот иши бўйича хулосалар молекулалараро таъсирлашув динамикаси ва спектроскопияси, ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион

сочилишининг замонавий назарияларидан фойдаланиб топилган ва квант-кимёвий моделлаштириш ёрдамида аниқланган натижаларга асосланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиш спектрлари орқали олинган натижалар кўпатомли молекулалардан ташкил топган суюқликлардаги молекулалараро таъсирлашувлар, релаксацион жараёнлар, шунингдек, молекулаларнинг қайта ориентацияланиш потенциал тўсиғининг температуравий ўзгаришлари ҳамда эритмалардаги энергиянинг резонанс алмашиниш механизмлари ҳақидаги тасаввурларни кенгайтиради ва модданинг суюқ ҳолати молекуляр назариясини ривожлантириш ҳамда улардаги яқин тартибликнинг қайта тақсимланиши билан боғлиқ структуравий ўзгаришларни назарий таҳлил қилиш имконини яратади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти шундаки, углеводордлардаги тебранма ва ориентацион релаксация жараёнларига метил ва галоид бирикмалари таъсирини аниқлаш молекулаларнинг иссиқлик ҳаракатини ва физик-кимёвий кинетикасининг механизмларини конкретлаштиришда, суюқликларнинг яқин тартиблилигини қайта тақсимланиши билан боғлиқ бўлган структуравий ўзгаришларни ифодалайдиган мукаммал назария яратишда ҳамда қайта мослашувчан суюқлик лазерларининг фаол муҳитлари учун назорат қилинадиган хоссаларга эга материаллар олишнинг асосланган технологияларини ишлаб чиқиш имконини беради.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Конденсирланган муҳитлардаги молекулалараро таъсирлашув спектроскопияси ва релаксацион жараёнлар кинетикасини тадқиқ қилиш бўйича олинган натижалар асосида:

ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган компонентаси контурини молекулаларнинг эркинлик даражасига мос холда таркибий қисмларга ажратиш усуллари 14-022 RG/MATHS/AS_G – UNESCO FR: 324028610 рақамли «Nonlinear evolution equations and transport on metric graphs arising from mesoscopic physics» Халқаро фанлар академиясининг халқаро грантида тармоқланган соҳаларда сочилган тўлқинларнинг улушини аниқлашда фойдаланилган (Фан ва технология агентлигининг 2017 йил 26 декабрдаги ФТА-02-11/1358-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш содда тармоқланган системаларда дисперсион жараёнларни соддалаштириш имконини берган;

ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиши бўйича тўпланган катта миқдордаги маълумотлар Бенгкулу университетида сувни, машина мойларини тозалашда, озиқ-овқат рафинировкасида ва минералларни идентификациялашда қўлланилган (Индонезиянинг Бенгкулу университети 2018 йил 12 июндаги 196104011986031001-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш турли хилдаги суюқликлар ва суюқ фазалардаги аралашмаларни аниқлашнинг самарасини ошириш имкониятини яратган;

ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари, фарқли ёндашувлар асосида ёруғликнинг турли молекуляр параметрларини ҳисоблашнинг квант-кимёвий усули А-7-23-рақамли "Маҳаллий сорбентлар ёрдамида мис ионларини оқова сувларидан ажратиб олиш технологияси" лойиҳасида оқава сувлар таркибида углеводородлар ва уларнинг галоидалмашинган бирикмалари мавжудлигини ҳамда ионалмашинувчи материаллар таркибидаги фунционал гуруҳларга технологик эритмалардаги мис ионларининг кимёвий боғлар оқали бирикиш эҳтимоллигини аниқлашда фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 йил 31 июлдаги 89-03-2779-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш оқава сувлар таркибидаги бирикма ва мис ионларини аниқлашнинг самарадорлигини оширган ва ионитларга мис ионларининг бирикишини олдиндан аниқлаш имкониятини яратган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Тадқиқотларнинг асосий натижалари 24 та, шу жумладан, 13 та халқаро ва 11 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза кўринишида баён қилинган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 42 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 18 та мақола, жумладан 10 таси хорижий, 8 таси республика журналларида нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация кириш, бешта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва иловадан ташкил топган. Диссертация ҳажми 254 бет матн, 52 та расм ва 15 та жадвалдан иборат.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг Ўзбекистон Республикаснинг фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мувофиқ ҳолда долзарблиги асосланган, тадқиқотнинг мақсади, вазифалари, объекти ва предмети аниқланган, ишнинг фан ва технологияларни ривожлантиришнинг муҳим йўналишларига мослиги кўрсатилган ҳамда тадқиқотнинг илмий янгилиги, амалий натижалари, натижаларнинг ишончлилиги, назарий ва амалий аҳамияти, натижаларнинг амалиётга жорий этилиши, эълон қилинганлиги, ишнинг тузилиши ҳақидаги маълумотлар, диссертация мавзуси бўйича мамлакатимизда ва хорижда амалга оширилган илмий-тадқиқотлар шарҳи келтирилган.

Диссертациянинг биринчи **"Ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиши спектрал таркибининг назарий ва амалий тадқиқ қилиш ҳолати"** номли бўлимида оптик тоза суюқликларда ва эритмаларда ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилиш спектрларининг назарий ва амалий тадқиқотлари натижаларга доир адабиётлар шарҳи келтирилган. Ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган компонентаси спектрининг суюқлик ҳолатига боғлиқ ҳолда

ўзгариши ва молекулалараро таъсирлашув спектрларининг суюқлик параметрларини ўрганиш учун қўлланилиш масалалари кўриб чиқилган. Флуктуацион ҳодисалар ва асоси углерод бўлган молекулаларнинг структуравий ўзгариши натижасида ёруғликнинг сочилиши спектрал таркибини ва интенсивлигини ўрганиш масалалари, суюқликларда ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган компонентаси спектрининг юқори частотали соҳасининг шаклланиш механизмлари бўйича адабиётларда келтирилган маълумотлар таҳлил қилинган. Ички ва молекулалараро таъсирлашувларнинг қўшган улушини конденсирланган фазада моддаларни ўрганиш учун ёруғликнинг комбинацион сочилиши спектроскопиясидан фойдаланиб ўрганишга бағишланган ишлар таҳлил қилинган.

"Суюқликларда ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилишини ўлчашнинг техникаси ва методикаси" номли иккинчи бобда частотанинг кенг интервалида ва юқори температураларда суюқликларда ёруғликнинг молекуляр ва комбинацион сочилишини ўрганиш бўйича спектрларни қайд этиш усули ва тажриба техникаси баён этилган. Тадқиқот объектларини танлашда, бир томондан, уларнинг тузилиши ўхшашлигига (асоси – бензол халқаси), бошқа томондан – молекулалар шакли ва алмашиниш характерини фарқлари асосий меъзон сифатида олинган. Ўрганилган суюқликларнинг оптик тоза намуналарини тайёрлаш методикаси келтирилган. Ўлчашлар ёруғликнинг молекуляр сочилишини қутбсизланган компонентаси спектрларини қайд этиш учун ДФС-4, ДФС-12 асбобларида ва суюқликлардаги ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари учун конфокал микроскопия усули асосида ишлайдиган STR250 лазер раман спектрометрида олиб борилди.

"Молекулаларнинг айланма ва тебранма релаксациялари параметрларини қайта ишлаш ва ҳисоблаш методикаси" мавзудаги учинчи бобда ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси спектрларини ва молекулаларнинг айланма релаксация ҳаракати параметрларини қайта ишлаш усуллари келтирилган. Натижаларни кетма-кет яқинлашиш усулида ечиш алгоритми ва тажриба контурини иккита лоренц ташкил этувчиларига ажратиш тартиби келтирилган. Спектрнинг Лоренц функциясига мос келмайдиган узоқдаги соҳалари экспоненциал функциялар ёрдамида қайта ишланди. Барча олинган маълумотлар компьютерга киритилди ва яна бир бор MATLAB дастурида ҳисобланди.

Молекулаларнинг структуралари, электрон тузилиши ва спектроскопик параметрларининг квант-кимёвий ҳисоблаш усуллари келтирилди ва олинган натижаларни тажриба билан солиштириш мақсадида GAUSSIAN ва ORCA квант-кимёвий дастурларга маълумотларни киритиш ва чиқариш тўғрисида қисқача маълумотлар кетма-кетлиги берилди.

Суюқликларда нейтронларнинг сочилиши бўйича спектроскопик усулнинг модификацияси асосида ёруғликнинг молекуляр сочилиш интенсивлигининг динамик ҳисоблашнинг амалий ва назарий усуллари таклиф этилди.

V ҳажмда N молекулалардан ташкил топган суюқликни кўриб чиқамиз, унда $\mathbf{R_i}(0)(\mathrm{i}=1,2,\ldots,N)$ заррачаларни вақтнинг бошланғич пайтидаги жойлашган ўрнини, $\mathbf{R_i}(t)$ эса бошқа пайтдаги жойлашган ўрнини билдиради. Гиббс ансамбли бўйича ўртача қийматларни ҳам киритамиз:

$$G_1(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0},0)=\frac{1}{N}\langle\sum_{1\le i\le N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}-\mathbf{R_i}(t)+\mathbf{R_i}(0))\rangle \quad (1)$$

$$G_2(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0'},0)=\frac{2V}{N(N-1)}\langle\sum_{1\le i<k\le N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0'}-\mathbf{R_i}(t)+\mathbf{R_k}(0))\rangle \quad (2)$$

Бунда қавс $\langle\ldots\rangle$ белгиси гиббс ансамбли бўйича ўртача қийматни системанинг бошланғич ҳолатига $(t=0)$ нисбатан олинганлигини билдиради. Суюқликларнинг изотроплиги туфайли қуйидагиларга эга бўламиз:

$$G_1(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0},0)=G_1(|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|,t),G_2(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0'},0)=G_2(|\mathbf{r}-\mathbf{r_0'}|,t) \quad (3)$$

$G_1(\mathbf{r},\mathbf{t})$ функциялари битта заррачанинг ўртача трансляцион ҳаракатини тасвирлайди. Таъкидлаш лозимки, $G(|r|,t)$ функция аниқ ҳисоблаб топилмаслиги туфайли, суюқликлар учун сочилган ёруғликнинг спектрини назарий ҳисоблашнинг якуний ифодасини топиш имкони мавжуд эмас. Бироқ баъзи бир соддалаштиришлар сийраклашган газлар учун қўлланилиши мумкин. Агар заррачаларнинг тўқнашувини инобатга олмасак, у ҳолда G_2 ва G_1 учун молекулалар тезлигига максвелл тақсимотидан қуйидагиларни оламиз:

$$G_1(|\mathbf{r}|,t)=\left(\frac{m}{2\pi k_BTt^2}\right)^{1/2}\exp\left\{-\frac{m|\mathbf{r}|^2}{2k_BTt^2}\right\} \quad (4)$$

бунда k_B – Больцман доимийси ва T - ҳарорат. Бу ифодани интенсивлик учун қўллаб, қуйидаги ифодани келтириб чиқарамиз:

$$I'_{\text{газ}}(\mathbf{R},\omega)=\frac{\alpha^2\omega^4N}{\pi c^4R^2}I_0\sin^2\gamma\left(\frac{\pi m}{2k_BT}\right)^{1/2}\frac{1}{\varkappa}\exp\left\{-\frac{m(\omega-\omega_0)^2}{2k_BT\varkappa^2}\right\} \quad (5)$$

Интенсивлик учун берилган ифодадан тескари фурье – алмаштиришлари ёрдамида қуйидагиларни келтириб чиқариш мумкин:

$$G(|\mathbf{r}|,t)-1=\frac{c^4}{(2\pi)^2\alpha^2}\int d\varkappa\int_{-\infty}^{\infty}d\Omega\,e^{-i(\Omega t-\varkappa r)}S(\varkappa,\omega) \quad (6)$$

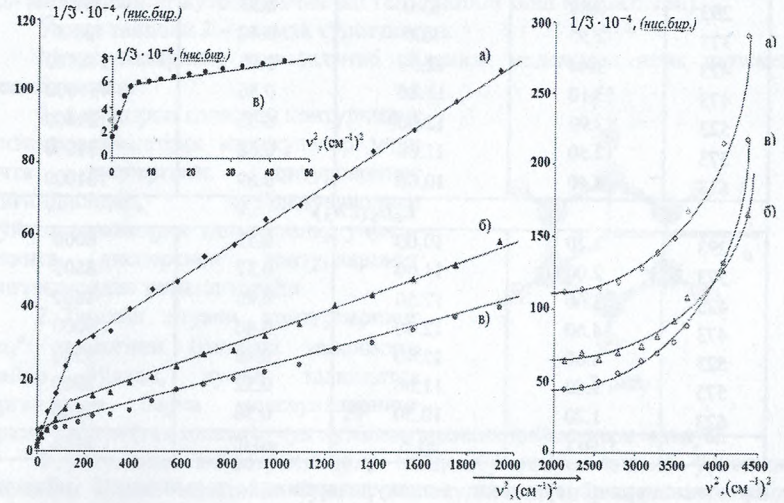
Агар ифода $\varkappa$ йўналишлар бўйича интегралланса, у холда

$$r\,G(|\mathbf{r}|,t)-1=\frac{2c^4}{(2\pi)^2\alpha^2}\int_0^{\infty}\varkappa d\varkappa\sin\varkappa r\int_{-\infty}^{\infty}d\Omega\,e^{-i\Omega t}S(\varkappa,\Omega). \quad (7)$$

Бу ифода ёруғликнинг молекуляр сочилиш интенсивлигини амалий ҳисоблашлар учун бевосита қўлланилиши мумкин.

Тўртинчи бобда "Ароматик углеводородларда ёруғликнинг ноқутбланган сочилиши спектрининг амалий тадқиқоти натижалари" келтирилган ва шулар асосида бензол ва унинг ҳосилалари, тўрт хлоридли углерод молекулалари ориентацион ҳаракатининг характери таҳлил қилинади. Бензолнинг турли температуралардаги ёруғлик молекуляр

сочилишининг ноқутбланган компонентаси контури спектрал зичлиги, яъни $1/\Im$ (бунда $\Im$ - интенсивлик)ни частотанинг квадратига боғлиқлик графиги 1 – расмда келтирилган.



1-расм. Ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси контури спектрал зичлигининг частота квадратига температуравий боғлиқлик графиги: а) 293 *K*; б) 423 *K*; в) 553 *K*.

Графикдан кўринадики, хона температурасида ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси $1/\Im\sim\nu^2$ координата ўқларида частотанинг 0~60 см$^{-1}$ интервалида иккита тўғри чизиқдан ("а") иборат. Бу бензолда ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси контури 0~60 см$^{-1}$ частоталар интервалида иккита лоренц контурларининг суперпозициядан ташкил топишини билдиради. Суюқлик температураси кўтарилган сайин контур мураккаблиги сақланиб қолади, лекин эгилиш нуқтаси қуйи частотали ("б" эгри чизиқ) соҳага томон силжийди ва температуранинг 553 *K* қийматида ингичка контур оғирлиги жуда кичик бўлиб қолади. Критик нуқтада ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси контурнинг мураккаблиги йўқолади.

Тажриба контурининг иккита лоренц чизиқлари орқали ифодалаш натижасида 0-60 см$^{-1}$ частоталар интервалида аниқланган анилин ва толуол учун контурларнинг параметрлари 1 – жадвалда келтирилган, бунда , σ_1, σ_2 – контурларнинг мос равишда "ингичка" ва "кенг" яримкенгликлари. α_2 - (α_1=α_2-1), контурнинг "кенг" ташкил этувчи қисм салмоғи, I- контурнинг интеграл интенсивлиги.

Барча ўрганилган моддалар учун хона ҳароратида 0~50-60 см$^{-1}$ частота интервалида кузатиладиган контур иккита – "ингичка" ва "кенг" дисперсион контурларнинг суперпозициясини намоён қилади.

1 – жадвал.

T, K	σ_1 ($см^{-1}$)	σ_2 ($см^{-1}$)	α_2	I(*нис.бир.*)
$C_6H_5NH_2$				
293	0.80	13.0	0.33	34900
373	2.50	13.0	0.40	73500
423	3.40	12.50	0.45	148500
473	3.10	11.80	0.56	157000
523	3.90	12.00	0.62	129400
573	2.50	11.00	0.68	131000
623	1.40	10.00	0.69	121000
$C_6H_5(CH_3)$				
293	1.20	10.00	0.33	8000
373	2.00	11.00	0.37	8500
423	2.60	12.50	0.40	8800
473	4.60	12.40	0.46	9000
523	4.60	12.40	0.49	9300
573	3.60	11.00	0.52	8900
623	1.20	10.50	0.56	7800
	±0.1	±1.5	±0.02	5-7%

Бу тасаввурлар суюқлик молекулаларининг тормозланиб айланиш модели нуқтаи назаридан тушунтирилади.

Молекулаларнинг тормозланиб айланиш модели асосида молекула инерция моментининг учта бош ўқларига нисбатан айланма ҳаракатлари ўзаро боғлиқ эмаслиги тўғрисидаги тахмин ётади. Молекула шаклининг турлилиги ва ички майдоннинг анизотропияси туфайли тормозланиш мавжудлиги сабабли инерциянинг алоҳида турли ўқлари бўйича айланма ҳаракат турлича бўлади. Кучли тормозланиш вақтидаги айланма ҳаракатни бир квазибарқарор ҳолатдан бошқасига сакраб бурилиши сифатида қараш мумкин.

Агар суюқликда яқин тартиблилик мавжуд бўлса, ҳар бир бош ўқ бўйича бурилиш учун ўртача анизотропия майдони тўғри келади. Бу айланма ҳаракатнинг ҳар бир ўқига мос, қийматлари бир-биридан катта фарқ қиладиган релаксация вақтлари мавжудлигига олиб келади. Молекуланинг учта ўқ бўйлаб мустақил айланиши анизотроп сочилиш спектрида "1/τ" катталик билан аниқланадиган яримкенгликка Δν эга учта дисперсион чизиқларнинг пайдо бўлишига олиб келади, бунда τ- анизотропиянинг тегишли ўққа нисбатан релаксацияси вақти. Муҳитнинг газ ҳолатидаги анизотроп сочилиш интенсивлиги қутбланувчанликнинг анизотропияси билан аниқланади. Хусусан, ҳар бир контурнинг нисбий улуши ёки умумий ҳолда "α_i" – салмоғи сочилиш контури билан боғлиқ айланиш ўқига перпендикуляр текисликдаги молекуланинг анизотропиясига пропорционал бўлиши лозим. Агар қутбланувчанлик ва инерция ўқлари ўзаро мос келса, у ҳолда

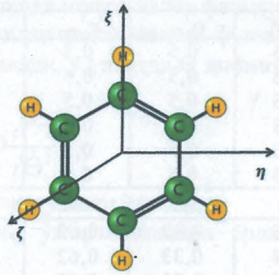
$$\alpha_i = \frac{(a_j - a_k)^2}{(a_i - a_j)^2 + (a_j - a_k)^2 + (a_k - a_i)^2} \qquad (8)$$

(a_i- молекуланинг қутбланувчанлик тензорининг бош қийматлари).

Ўқлар танлови 2 – расмда кўрсатилган.

Молекулаларнинг тормозланиб айланиш моделидан аниқ натижалар келиб чиқади:

1. Анизотроп сочилиш контурининг чизиғи асимметрик молекулалар учун учта дисперсион контурларнинг йиғиндисидан, қутбланувчанлиги бўйича симметрик молекулалар учун – иккита дисперсион контурларнинг йиғиндисидан ташкил топади.



2-расм.

2. Ташкил этувчи контурларнинг "α_i" салмоғини баҳолаш имконияти пайдо бўлади, чунки тадқиқотда ўрганилган барча молекулаларнинг эркин ҳолати (газ ҳолати) учун қутбланувчанлик қийматлари маълум.

Флуктуацион анизотропиянинг пайдо бўлишини қатъий ўрнатилган тартибда кўриб чиқадиган бўлсак, молекуланинг вибрацион ҳаракатидан келадиган улушни инобатга олиш зарур бўлади. Хусусан, вибрацион ҳаракат билан боғлиқ бўлган флуктуациялар кенг контурда ўзининг салмоғини намоён этиши керак.

Анизотроп молекулалар учун вибрацион механизмнинг салмоғини газ ҳолатидаги қийматлар $\alpha^1_{газ}$, $\alpha^2_{газ}$ ва "t" температурада тажриба орқали топилган α_1 ва α_2 ёрдамида тақрибан ҳисоблаш мумкин. Вибрацион механизм фақат кенг контурга таъсир этишини инобатга олиб, айланма ва вибрацион ҳаракатнинг салмоқларини қуйидаги ифодалардан фойдаланиб топишимиз мумкин:

$$\alpha_{вибр} = \frac{\gamma}{1+\gamma};\ \alpha_{вращ} = \frac{1}{1+\gamma},\quad \text{бунда}\quad \gamma = \frac{1}{\alpha_2^{газ}}\left(\frac{\alpha_1^{газ}}{\alpha_1^{э}} - 1\right). \qquad (9)$$

2 – жадвалда бензол, бромбензол, м-ксилол ва анилинда бир қатор температураларда ҳисоблаб топилган қийматлар $\alpha_{теб}$ ва $\alpha_{айл}$ келтирилган.

Жадвалдан кўриниб турибдики, температура ортиб бориши билан вибрацион механизмнинг $\alpha_{виб}$ салмоғи бензол, анилин учун сезиларли даражада ортади.

Температуранинг ортиши ва критик температурага яқинлашиш билан, анизотроп молекулалардан ташкил топган суюқликлардаги ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентасининг контури 0-60 $см^{-1}$ спектрал интервалда вибрацион механизм билан боғланган битта дисперсион соҳада намоён бўлади, деб тахмин қилиш мумкин.

Бу фикрни бензол суюқлигида T=553 *K* да (бензол учун критик ҳарорат T=562,5 *K*) ўтказилган ёруғлик молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентасининг температурага боғлиқ тажриба натижалари ҳам тасдиқлайди. Бу тажриба натижалари – критик ҳолат яқинида суюқлик молекулаларининг иссиқлик ҳаракати ўзгаришининг исботдир.

2- жадвал.

Бензол							
T, *K*	$\alpha^2_{газ}$	$\alpha^1_{газ}$	$\alpha^2_{экс}$	$\alpha^1_{экс}$	γ	$\alpha_{теб}$	$\alpha_{айл}$
423	0,5	0,5	0,56	0,44	0,27	0,21	0,79
473	0,5	0,5	0,63	0,37	0,70	0,41	0,59
523	0,5	0,5	0,71	0,29	1,45	0,59	0,41
533	0,5	0,5	0,71	0,29	1,45	0,59	0,41
543	0,5	0,5	0,72	0,28	1,57	0,61	0,39
553	0,5	0,5	0,73	0,27	1,70	0,63	0,37
Бромбензол							
523	0,33	0,62	0,41	0,59	0,15	0,13	0,87
574	0,33	0,62	0,5	0,5	0,73	0,42	0,58
625	0,33	0,62	0,58	0,42	1,44	0,59	0,41
м-ксилол							
573	0,38	0,59	0,47	0,53	0,30	0,23	0,77
593	0,38	0,59	0,51	0,49	0,54	0,35	0,65
603	0,38	0,59	0,53	0,47	0,67	0,40	0,60
613	0,38	0,59	0,55	0,45	0,82	0,45	0,55
Анилин							
423	0,41	0,58	0,43	0,57	0,04	0,04	0,96
473	0,41	0,58	0,45	0,55	0,13	0,12	0,88
523	0,41	0,58	0,49	0,51	0,33	0,25	0,75
573	0,41	0,58	0,54	0,46	0,64	0,39	0,61
623	0,41	0,58	0,6	0,4	1,10	0,52	0,48

Молекулаларнинг айланма эркинлик даражаси “музлайди” ва фақат вибрацион, аниқроғи молекулаларнинг кооператив ҳаракати билан боғлиқ вибрацион ҳаракатлар уларнинг ўрнини эгаллайди.

Тажрибадан олинган маълумотлар таҳлили шуни кўрсатадики, контурнинг марказдан узоқ қисмларида, яъни ν~60 $см^{-1}$ дан бошлаб бензол ва унинг ҳосилалари учун экспонентанинг сўнувчи $P=2$ даражада қиймати энг яхши мос келади, яъни интенсивликни қанотлардаги сўниши гаусс функцияси бўйича содир бўлади. Суюқликларда ёруғликнинг сочилиш қанотининг марказдан узоқ соҳаларини пайдо бўлиш механизмларини тушунтиришда флуктуация назариясидан фойдаланамиз.

Флуктуациянинг бир потенциал майдондан бошқасига ўтиши шу флуктуация мавжуд конфигурациянинг ўзгариши туфайли содир бўлади, яъни структурада яқин тартиблилик ўзгаради. Бу жараённи ўзига хос иккинчи турдаги фазовий ўтиш деб қараш мумкин. Иккинчи турдаги фазовий ўтишлар вақтида эркин энергия ўзгармайди, балки энтропия ўзгаради, яъни тақсимланиш функцияси ўзгаради.

Бошқача айтганда, флуктуациянинг бир ҳолатдан бошқасига ўтиши когерент ҳолатда, яъни фазоланган ҳолатда содир бўлади, кейинчалик алоҳида молекулалар фазалари текис тақсимланади, бу диффузия жараёни ҳисобига эришилади. Ҳақиқатан, суюқликдаги молекула жойлашган майдон, яъни вақт функцияси E(t). $\Delta E/E<<1$ бўлгани учун бу майдоннинг флуктуацияси, ориентация флуктуацияларига олиб келмайди, фақат молекулаларни аста тебратиши мумкин. Бу алоҳида молекулалар фазасини Θ ансамблдаги флуктуациясига олиб келади. Бундан тақсимланиш функцияси $f(\Theta,t)$ учун Фоккер-Планк тенгламаси келиб чиқади, у t вақтда Θ қийматнинг амалга ошиш эҳтимоллигини аниқлаб беради:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = K\frac{\partial}{\partial \dot{\Theta}}[\dot{\Theta}] + D\frac{\partial^2 f}{\partial \dot{\Theta}^2} \qquad (10)$$

Бунда *K* - сўниш тезлиги, *D* – тасодифий кучнинг қуввати ўлчови.

$\kappa t<<1$ ҳолат учун бу тенгламани Фурье ўзгартиришлари ёрдамида олинган ечими гаусс шаклини олади:

$$\Phi(\omega) = \exp[-\frac{\omega^2}{2D}] \qquad (11)$$

Бундай вазиятларда ~10^6 молекулалардан иборат когерент ансамбль ҳосил бўлиши тўғрисида гапириш мумкин.

Флуктуация – бу эҳтимоллиги катта бўлган ҳолатдан кичик бўлган ҳолатга ўтишдир, яъни флуктуация – бу мувозанатсиз ҳолат, мувозанатсиз ҳолат эса тартиблиликни келтириб чиқаради. Флуктуация когерент заррачалардан пайдо бўлади, кейинчалик диффузия жараёни ҳисобига фазалар қайта текис тақсимланади.

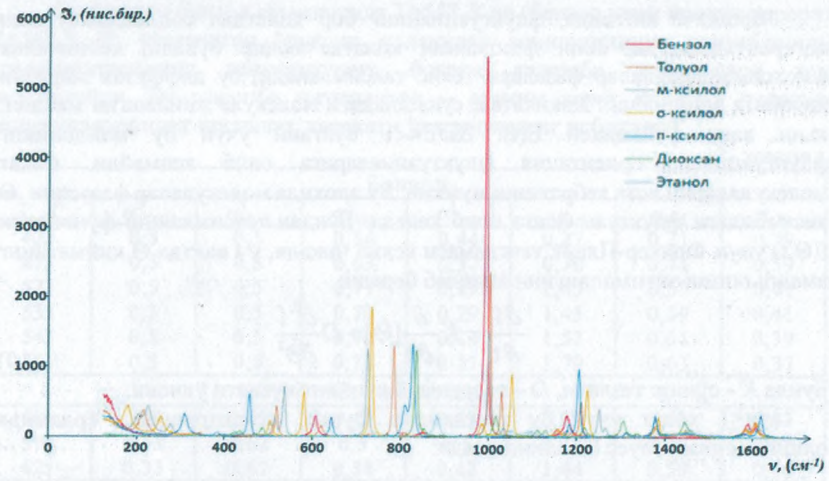
Диссертациянинг бешинчи **“Ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрини экспериментал тадқиқ қилиш натижалари”** номли боби ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектроскопияси яратадиган молекуляр структура ва молекулалар ҳаракатини таҳлил қилишнинг кенг имкониятларини кўрсатиб беради.

Ўрганилган тоза суюқликлар учун ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрининг умумий кўриниши спектрнинг маркази 1000 $см^{-1}$ соҳаси учун 3 – расмда келтирилган.

Тажриба маълумотларига кўра, ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларининг тоза бромбензол учун $C-Br$, толуол, орта-, мета- ва параксилоллар учун $C-H$, диоксан, этанол учун $C-O$ тебраниш полосалари мураккаб тузилишга эга[3].

Энг катта интенсивликка эга бўлган полоса 3077 $см^{-1}$ бўлиб, унинг фонида интенсивлиги катта бўлмаган 3142 $см^{-1}$ чизиқ ётади. Бу барча чизиқлар битта тебранишга $C=H$ тегишли эканлигини кўрсатади.

[3] Тажрибалар Токай университетининг (Япония) илмий лабораториясида 2016 йилнинг сентябрь – декабрь ойларидаги стажировка даврида муаллиф томонидан амалга оширилган ва бунинг учун университет раҳбариятига чукур миннатдорчилик билдирамиз.



3-расм. Ўрганилган тоза суюқликларда ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрининг 50-1600 см$^{-1}$ соҳа учун умумий кўриниши.

Умумий структуравий белгиларга эга бўлган бирикмаларнинг спектрлари солиштирилганда, қатор ҳолатларда битта молекуладан бошқа молекулага ўтганда частоталар билан бирга чизиқларнинг бошқа параметрлари – интенсивлик, кенглиги ва ноқутбланиш даражаси ўз қийматини сақлаб қолади. Натижаларга кўра, молекулалар тузилишидаги ҳар қандай структуравий тармоқланишлар уларнинг спектрларида характеристик чизиқларни пайдо бўлишига олиб келавермайди. Фақат атомлар ёки боғларнинг баъзи бир махсус гуруҳлари ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларларида характеристик чизиқларга эга бўлади.

Метилалмашинган ксилолларнинг қуйи частотали спектрларида кўп сонли чизиқлар аниқланди. Структура формуласига хос, метил CH_3 гуруҳининг айланма тебранишларидан ташқари (мета-ксилол учун 205 см$^{-1}$, 226 см$^{-1}$, 276 см$^{-1}$; орто-ксилол учун 179 см$^{-1}$, пара-ксилол учун 255 см$^{-1}$, 436 см$^{-1}$; 310 см$^{-1}$, 384 см$^{-1}$, 457см$^{-1}$) спектрларда деформацион тебраниш спектрлари ҳам кузатилиши мумкин. Ксилоллар модификациясининг ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларининг қуйи частоталари жуда бой чизиқларга эга бўлганлиги сабабли айланма тебранишларга мос чизиқларни аниқлаш қийин. Бу, айланма тебранишлар билан бирга деформацион тебранишлар кузатилишини билдиради. Агар оғир гуруҳлар бириктирилган молекулалар учун, одатда айланма тебранишларнинг чизиқларига спектрнинг энг қуйи частотали соҳасида ётадиган чизиқлар мос келса, метил гуруҳларининг айланма тебранишларига тегишли чизиқлар кенг спектрал, рэлей чизиғи қанотидан бошлаб 500 см$^{-1}$ гача соҳада ётиши кузатилади. Бунга сабаб метил гуруҳининг инерция моменти катта эмаслигидир.

Мураккаб молекулаларнинг потенциал тўсиқларини ҳисоблаш учун квант-кимёвий ҳисоблашлар ёрдамида такомиллаштирилган ярим эмпирик усулдан фойдаланилди. Ксилол модификацияларида кимёвий боғланмаган атомларнинг $H\cdots H$ ва $C\cdots H$ кўринишидаги икки типдаги таъсирлашувлари мавжуд бўлиб, уларни ҳисоблашлар бу усуллардан фойдаланилди. Ўрганилган молекулаларнинг учун аниқ структуравий маълумотлари (боғ узунлиги ва бурчаклар) квант-кимёвий ҳисоблаш усуллари ёрдамида аниқланган.

Ҳисоблашлар кўрсатишича, пара, орто, мета-ксилол молекулалари учун водород атомлари ўртасидаги итарилиш функцияси қуйидаги кўринишга эга эканлиги аниқланди:

$$U = 950{,}5\exp(-1{,}98r) - 1995\exp(-3{,}76r) \qquad (12)$$

Бошқа атомларнинг таъсирини инобатга олмаганда ушбу ифода тажриба натижалари мос келади ва бунда r - водород атомлари ўртасидаги ангестремларда келтирилган масофадир. Ўрганилган моддаларнинг частота қийматлари бўйича потенциал тўсиқларини ҳисоблаш ва тажрибадан олинган натижалари 3 – жадвалда келтирилган.

3 – жадвал.

Модда	*U, кал/моль (ҳисоб)*	*ν, см$^{-1}$*	
		ҳисоблаш	*тажриба*
Пара-ксилол	4000	291	310
Орто-ксилол	4000	163	179
Мета-ксилол	4000	212	205

Таъкидлаш жоизки, частотанинг қийматлари потенциал тўсиқларнинг қийматларини ўзгаришига нисбатан сезгирлиги жуда камдир. Буни U нинг катта қийматларидаги потенциал тўсиқ баландлиги ва айланма тебранишлар частотаси ν ўртасидаги боғлиқликдан ҳам кўриш мумкин. Бу ҳолатда потенциал тўсиқ U баландлиги билан айланма тебранишлар частотаси ν ўртасидаги боғлиқлик оддий кўринишга эга бўлади:

$$\nu = \frac{}{2\pi c}\sqrt{\frac{U}{2}} \qquad (13)$$

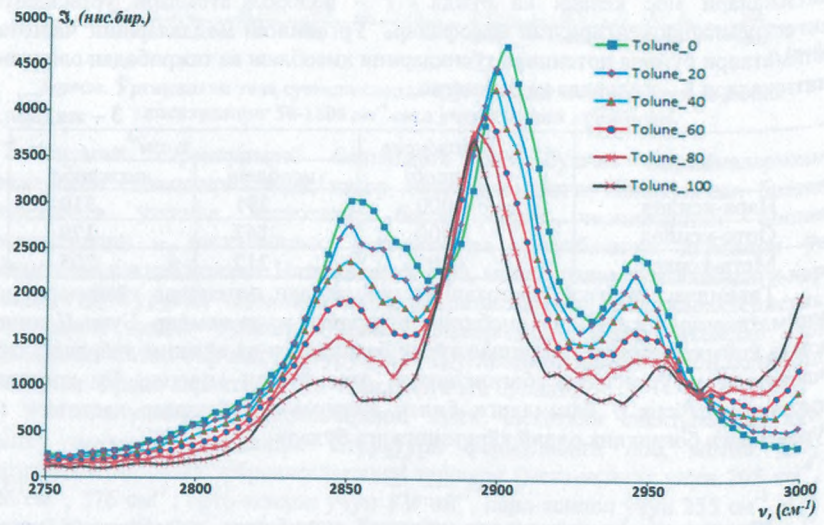
Юқоридаги формулалардан кўриниб турибдики, ҳисоблашлар учун айланма тебранишлар учун келтирилган инерция моментини $I_{\text{пр}}$ билиш керак бўлади. Молекуланинг симметрик пирилдоқ кўринишидаги айланма гуруҳи мавжуд бўлганда, инерция моменти учун келтирилган ифода қуйидаги кўринишда бўлади:

$$I_{\text{пр}} = \Im_{\varphi}\left(1 - I_{\varphi}\sum_i \frac{K_i^2}{I_i}\right), \qquad (14)$$

Бунда i– 1,2,3; I_i – бутун молекуланинг инерция моментлари; K_i - пирилдоқ ўқи билан инерциянинг бош ўқларини ҳосил қилган бурчакларнинг йўналтирувчи косинуслари; I_{φ} - айланиш ўқига нисбатан пирилдоқ инерциясининг моменти.

3 – жадвалдан кўриниб турибдики, частоталарнинг ҳисоблаб топилган ва тажрибада олинган қийматлар ўзаро мослиги қониқарлидир. Мета-ксилолда айланма тебранишларга 205 ёки 226 $см^{-1}$ частотаси мос келиши мумкин, чунки частоталарнинг ҳисоблаб топилган қийматлари 212 $см^{-1}$га тенг. Пара-ксилол, орто-ксилол ва мета-ксилол учун тўсиқларни ҳисоблашда бир хил қийматлари олинади, чунки метил гуруҳлар бир биридан узоқда жойлашган, уларнинг атомлари ўзаро таъсирлашмайди. Айланма тебранишларнинг бу моддалар учун топилган частоталари тахминан битта соҳада ётиши керак.

Ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари чизиғининг толуол-этанол, бензол+диоксан ва бензол+этанол эритмаларида концентрациянинг кенг интервалида частота бўйича силжишини ўрганиш натижалари келтирилган бўлиб, 4–расмда тоза толуолни этанолли эритмаларидаги чизиқлари келтирилган.



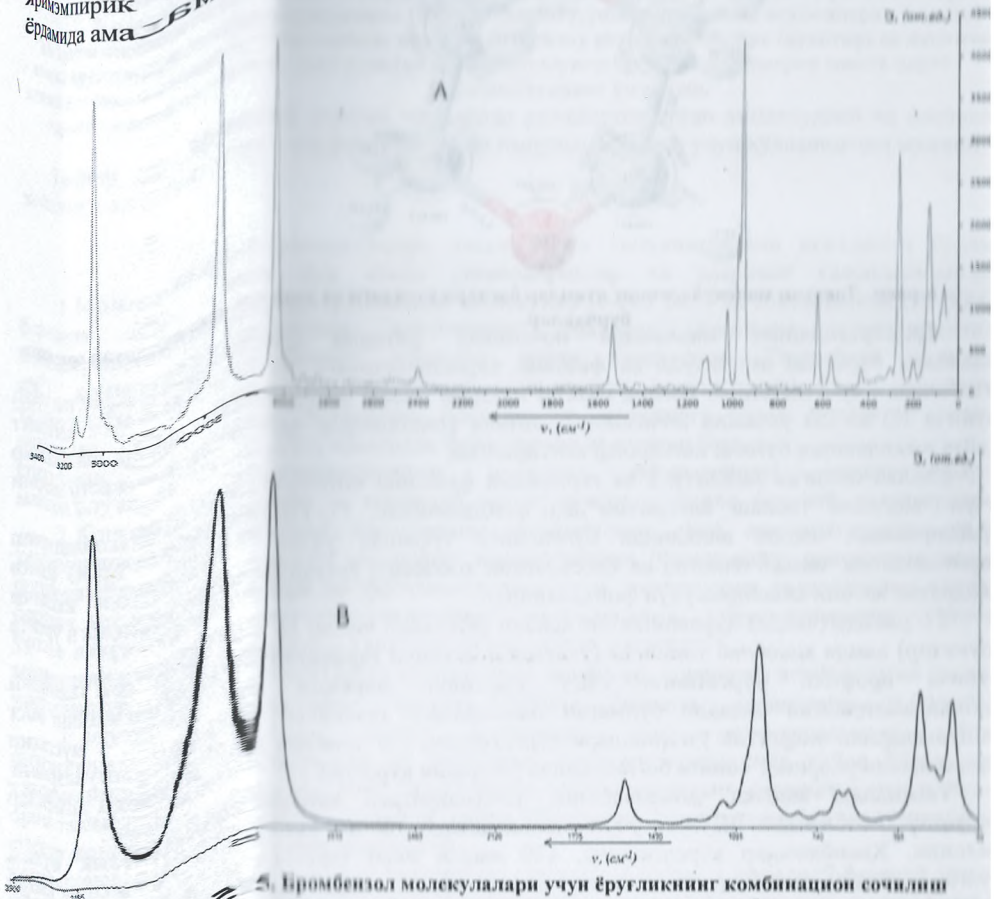
4 - расм. Толуолнинг этанол билан эритмасидаги ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари.

Спектрлар мураккаб ва аралашма концентрацияси ўзгариши билан кучли ўзгаришга эга эканлиги кузатилди. Ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларининг частотали силжишини $\Delta\nu$ экспериментал тадқиқотлари натижалари толуол чизиғи учун 2941 $см^{-1}$, диоксан учун 2941,59 $см^{-1}$ ва этанол учун концентрацияларнинг ўрганилган интерваллари да $\Delta\nu$ катталикни концентрацияга чизиқли боғлиқлиги кузатилади.

Частота $\Delta\nu$ нинг концентрацияга чизиқли боғлиқлигини таҳлили кўрсатишича, эритувчини арлаштириш спектр чизиғини кучли кенгайишига олиб келади. Масалан, аралашмадаги толуолни миқдори 0.8 м.у. бўлганда, бу

чизиқнинг ке[illegible] -ги кенглиги, тоза этанолнинг чизиғини кенглигидан 1,5 баробар катта бўлади.

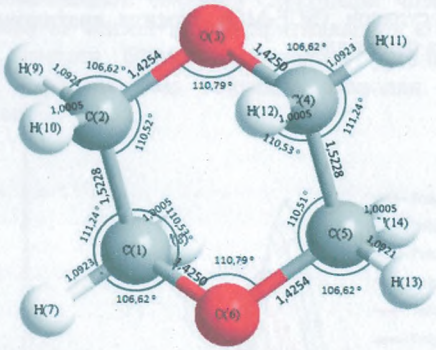
5–расмда [illegible] асосида лазер сканирловчи конфокал микроскопда олинган ёруғликнинг [illegible] -тининг комбинацион сочилиш спектрлари бўйича тажриба натижалари келтирилган. [illegible] -ятган. Улар назарий квант-кимёвий усуллар ёрдамида бажарилган ҳисоблашлар [illegible] дастурлар билан солиштирилган. Бу ҳисоблашлар электрон структурани замонавий ҳисоблаш усулларидан иборат яримэмпирик квант кимёси учун *ab initio* дастурлари [illegible] -турлари, зичликнинг функционал назарияси (DFT), кўпўлчамли кўзғолиш, боғланган кластер, кўпрежимли усуллар ва квант кимёсининг яримэмпирик [illegible] усуллари (SCF-MO) асосида яратилган ORCA дастурлари ёрдамида амалга оширилди.



Расм.5. Бромбензол молекулалари учун ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрлари чизиғи интенсилигининг частотага боғлиқлиги.
А – тажриба, В –квант-кимёвий ҳисоблашлар.

Молекулаларнинг конформацияларини тасвирлаш, атом боғларининг катталигини аниқлаш, улар орасидаги бурчаклар қиймати топишда HF/6-31G** Хартри–Фок моделининг жуда фойдали бўлиб, диоксан мисолидаги бундаё ҳисоблаш натижалари 6 – расмда келтирилган.

Минимал ва валент-парчаланган базислардан фойдаланганда олинган натижалар тажрибада олинган натижаларига мос келади. Базиснинг кенгайиши валент боғлардаги атомлараро масофаларнинг камайишига олиб келади. Электрон корреляцияни ҳисобга олиш валент боғларнинг узунлигини ортишига ва ҳисоблашлардаги хатоларни камайишига олиб келади.



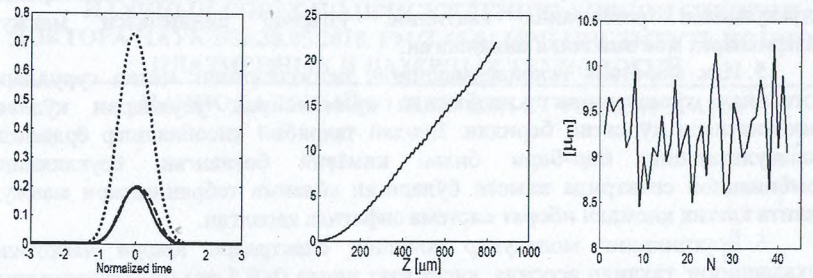
6-расм. Диоксан молекуласининг атомлар боғлари узунлиги ва улар орасидаги бурчаклар.

Диссертациянинг **иловасида** ночизиқли фотонли кристалларда олдиндан берилган амплитуда ва фазовий характеристикага эга когерент манбаларни яратиш билан боғлиқ бўлган назарий ишлар ва бу назариялар бўйича 1D ва 2D ўлчамли ночизиқли фотонли кристалларда частоталарни қайта шаклланиши бўйича натижалар келтирилган.

Танлаб олинган амплитуда ва гармоника фазасини оптималлаштириш учун “моделли тоблаш алгоритми”дан фойдаланилди. PG-FROG изини трассировкаси юқори аниқликда бўлганлиги туфайли, ундан иккинчи гармониканинг танлаб олинган ва ҳисобланган хоссалари ўртасидаги ўртача квадратик хатони ҳисоблаш учун фойдаланилди.

7 – расмда (чапда) нурланишнинг асосий (нуқтавий чизиқ) ва тахминий (пунктир) ҳамда ҳисоблаб топилган (узлуксиз) иккинчи гармониканинг вақт бўйича профили кўрсатилган. Шу расмнинг марказда мустақил лойиҳалаштирилган чизиқли бўлмаган панжарадаги таъсирлашувларнинг импульсларини энергетик ўзгаришлари кўрсатилган. Ўнг томонда доменлар ўлчамларини уларнинг сонига боғлиқ ҳолда ўзгариши кўрсатилган.

Таъкидлаш жоизки, доменларнинг ўлчамларидаги хатолик муҳим параметр ҳисобланади. Шунинг учун ҳисоблашларда 100 нм. хатолик қабул қилинди. Ҳисоблашлар кўрсатишича, 100 нмдан икки тартибга кўпроқ бўлган хатолик ҳисоблар натижасига таъсир кўрсатмайди. Бунда қайта ўзгаришларнинг самарадорлиги хатолик ўзгариши билан ўзгармади.



7-расм. Иккинчи гармоника импульсининг 100 фс модель тобланиш алгоритмини 20% эффективлик билан (марказда) литий ниобат кристалли учун асосий ёруғланишнинг 1550 нм. тўлқин узунлигида олинган натижалари: (чапдан) асосий ёруғланишнинг профили (нуқтали), режалаштирилган (пунктир) ва иккинчи гармоникани олинган профили (узлуксиз); (ўнгда) доменларни сонига қараб ўлчамларининг ўзгариши.

Таклиф этилган натижалар режалаштирилган амплитудали ва фазовий хоссаларга эга фемтосекундли импульслар олиш учун қўлланилиши мумкин.

ХУЛОСАЛАР

1. Молекулалараро таъсирлашув қонуниятларини аниқлашга ёрдам берадиган бир қатор углеводородлар ва уларнинг галоидалмашган ҳосилаларида ёруғликнинг молекуляр (0-200 $см^{-1}$) ва комбинацион (50-5000 $см^{-1}$) сочилиш частоталари соҳасида комплекс экспериментал тадқиқотларининг оригинал цикли бажарилган. Тажрибада олинган натижалар молекулалараро таъсирлашув қонуниятлари билан сочилиш спектрлари ўртасидаги боғлиқликни аниқлашга ёрдам берадиган локал майдон флуктуациясидан фойдаланиш имконини беради.

2. Конденсирланган муҳитлар физикасининг молекулалараро таъсирларини ва мураккаб молекулаларнинг турли фазовий ҳолатлардаги физик-кимёвий хоссаларини ўрганишнинг янги имкониятларини очиб берувчи муҳим молекуляр параметрларни (броун қайта ориентацияланиш ўртача даври ва фаолланиш энергияси, анизотропия релаксацияси вақти, молекулаларнинг потенциал чуқурликдаги тебранишларнинг ўртача частоталари ва б.) аниқлаш усули ишлаб чиқилган.

3. Муҳитларда ёруғликнинг молекуляр сочилиши ноқутбланган қисми интенсивлигининг частота бўйича берилган соҳасидаги (0-60$см^{-1}$) тақсимланиши иккита контурдан, яъни молекулаларнинг қайта ориентацияланиши ва вибрацион ҳаракати натижасида пайдо бўладиган спектр контурининг “тор” ҳамда молекулаларнинг потенциал чуқурликда ҳаракатланиши туфайли пайдо бўладиган “кенг” таркибий контурлардан иборат бўлиши аниқланган.

4. Модданинг “анизотроп суюқлик – изотроп суюқлик” фазовий ўтиш температураси (критик температура) яқинида ёруғликнинг ноқутбланган (анизотроп) сочилиш спектри торайишининг физикавий механизмлари

аниқланди ва тажриба ёрдамида аниқланган спектр кенглиги ва анизотропия флуктуацияси релаксация вақтининг ўзгариш динамикаси мавжуд назарияларга мос эмаслиги аниқланган.

5. Илк маротаба галоидалмашинган бензолларнинг метил гуруҳлари потенциал тўсиқларини ҳисоблашда яримэмпирик усулларни қўллаш имкониятлари кўрсатиб берилди. Бундай тақрибий ҳисоблашлар ёрдамида молекулаларнинг бир-бири билан кимёвий боғланган, ёруғликнинг комбинацион спектрида намоён бўладиган айланма тебранишлари мавжуд иккита қаттиқ қисмдан иборат система сифатида қаралган.

6. Ёруғликнинг молекуляр сочилиш спектрлари юқори частотали соҳаларининг таҳлили асосида, қисқа вақт ичида ($t<0.5$ пс) молекулаларнинг айланма ҳаракати эркин тебранишлар (вибрациялар) характерига эга эканлиги ва контурининг шакли тўқнашувларсиз релаксация моделига асосланган гаусс функцияси билан таърифланиши кўрсатилди. Таклиф этилган механизмда анизотроп молекулалардан ташкил топган исталган суюқликлар учун ҳам қўллаш тавсия этилган.

7. Биринчи марта температура ортиши ва суюқликнинг критик ҳолатга яқинлашиши билан марказий лоренцианни гауссианга ўтиш частоталари соҳаси юқори частоталар томонга силжиши кўрсатиб берилди ва бу дефазировка ҳисобига юқори частотали спектр соҳаси пайдо бўлади, деган гиотезани тасдиқлади. Ёруғликнинг молекуляр сочилишининг ноқутбланган компонентаси спектрининг юқори частотали қисми шаклига қараб, суюқликларда статистик физиканинг фундаментал ҳодисаси – фазовий ўтишлар тўғрисидаги маълумотни олиш мумкинлиги кўрсатилган.

8. Биринчи марта фарқли ёндашувлар асосида ёруғликнинг турли молекуляр параметрларини (потенциал чуқурлик баландлиги U, айланма тебранишларнинг частотаси ν, тебраниш частотаси силжиши $\Delta\nu$) ҳисоблаш амалга оширилди. Барча ўрганилган системалар учун абсолют спектрал силжишларнинг ҳисоблаб топилган қийматлари тажрибада топилган маълумотларга мос келиши исботланган.

9. Энергиянинг резонанс ўтиши, кучли молекулалараро таъсирлашувлар мавжуд суюқликларда спектр контурларини кенгайишидан ташқари, концентрациявий комбинацион сочилиш спектрларининг маълум бир тебраниш чизиқларининг максимумларига мос келмаслиги аниқланди. Ёруғлик комбинацион сочилиш спектри максимум частоталарининг этанол+толуол ва этанол+диоксан ($\Delta\nu$ – манфий) ва бензол+диоксан ($\Delta\nu$ – мусбат) эритмаларига мос келмаслиги энергиянинг резонанс алмашиниш механизми билан боғлиқлиги аниқланган.

10. Илк маротаба айланма тебранишларга тегишли частоталар потенциал чуқурлик баландлиги билан боғлиқлиги аниқланган. Потенциал чуқурлик баландлигининг ҳисобланган қийматлари термодинамик ҳисоблашларда фойдаланилиши тавсия этилган. Органик моддаларнинг ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрларидаги айланма тебранишлар частоталарини башорат қилишнинг истиқболли усули ишлаб чиқилган.

НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК DSc.30.05.2018. FM/T.65.01 ПРИ ИНСТИТУТЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА

ЭШЧАНОВ БАХОДИР ХУДАЙБЕРГАНОВИЧ

СПЕКТРОСКОПИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ И КИНЕТИКА РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

01.04.05 – Оптика

АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИДОКТОРА (DSc) ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

ТАШКЕНТ–2018

Тема докторской (DSc) диссертации зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № B2017.1.DSc/FM29.

Диссертация выполнена в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещён на веб-странице Научного совета (http://iplt.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziyonet.uz).

Научный консультант: **Отажонов Шавкат,**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Ташкенбаев Улугбек Негматович,**
доктор физико-математических наук, профессор

Дорошенко Ирина Юрьевна,
доктор физико-математических наук (Украина)

Нематов Шерзод Каландарович,
доктор физико-математических наук

Ведущая организация: **Самаркандский государственный университет**

Защита диссертации состоится «20» 10 2018 г. в 14 00 часов на заседании Научного совета DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий (Адрес: 100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йули, 33. Тел./факс: (99871) 262-31-69, e-mail: info@iplt.uz, зал заседаний Института ионно-плазменных и лазерных технологий).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (регистрационный номер 5). Адрес: 100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йули, 33.

Автореферат диссертации разослан «10» 10 2018 г.
(протокол реестра № 5 от «10» 10 2018 г.).

Х.Б.Ашуров,
председатель Научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с.

Д.Т. Усманов,
ученый секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с.

Б.Е.Умирзаков,
председатель научного семинара при Научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация докторской (DSc) диссертации)

Актуальность и востребованность темы диссертации. Множество проводимых в мире научно-практических исследований показывают актуальность исследования природы и силы межмолекулярных взаимодействий (ММВ) в конденсированных средах. Изучение динамики межмолекулярных взаимодействий среды со сложными многоатомными молекулами разной природы является актуальным направлением современной спектроскопии конденсированных сред. ММВ существенно влияют на различные оптофизические процессы, в частности на процесс переноса энергии возбуждения между молекулами, участвуют в формировании оптических параметров конденсированных систем.

Как показывают проводимые во всем мире исследования, ведущее место в исследовании релаксационных процессов в жидкой фазе занимают спектроскопические методы, среди которых определенным преимуществом обладает спектроскопия молекулярного рассеяния света (МРС), особенно его деполяризованной компоненты, и комбинационное рассеяние света (КРС). Создание замкнутой теории жидкого состояния вещества, несомненно, является актуальной задачей прежде всего потому, что с ее помощью можно получить надежные данные о структуре жидкости, о влиянии на эту структуру теплового движения молекул. Тепловое движение молекул в жидкости определяет их основные физические свойства и макроскопические характеристики. Его описание базируется на ряде созданных теоретических моделей, которые, однако, пока настолько далеки от совершенства, что применительно к многоатомным соединениям не дают методов расчета большинства характеристик. Противоречивы и неполны также имеющиеся экспериментальные данные.

В нашей республике усилилось внимание к актуальным направлениям в области науки, имеющим прикладное значение, в частности накоплен богатый экспериментальный материал по структуре молекулярного и комбинационного рассеяния света и выявлены основные закономерности их формирования. Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017–2021 годы предусматривает «освоение выпуска принципиально новых видов продукции и технологий, обеспечение на этой основе конкурентоспособности отечественных товаров на внешних и внутренних рынках»[4]. В связи с этим создание строгой молекулярной теории в сильно флуктурирующих средах и получение новых материалов с заданными свойствами, а также их внедрение в производство приобретают важное значение.

Настоящая диссертация в определённой степени посвящена решению задач, обозначенных в Постановлениях Президента Республики Узбекистан

[4]Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017–2021 годы // Приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № УП-4947, п. 3.2.

№-УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по развитию Республики Узбекистан в 2017–2021 годы» от 7 февраля 2017 года, №-ПП-1442 «О приоритетах развития промышленности в 2011–2015 годах» от 15 декабря 2010 года и №-ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также других нормативно-правовых актах по данной деятельности.

Связь исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий республики. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации[5].

Научные исследования в области физики и спектроскопии ММВ конденсированных сред, а также исследования физико-химических процессов, протекающих в различных средах, проводятся в ведущих научных центрах, высших образовательных учреждениях, в том числе в University of California (США), University of Nevada (США), Ohio State University (США), Columbia University (США), Colorado State University (США), Johannes Gutenberg University (Германия), University of Munchen (Германия), University of Bayreuth (Германия), University of Kent (Англия), University of Uppsala (Швеция), University of Tokyo (Япония), Gakushuin University, Tokay University (Япония), Физическом институте имени П.Н. Лебедева (Россия), Физическом институте СО РАН (Россия), Санкт-Петербургском, Уфимском (Россия), Киевском (Украина), Белорусском (Белорусия) государственных университетах, Кемеровском государственном педагогическом институте (Россия), Институте ионно-плазменных и лазерных технологий (Узбекистан), Национальном университете Узбекистана, Самаркандском государственном университете (Узбекистан).

По направлению исследований спектроскопии ММВ конденсированных сред на мировом уровне был решен ряд актуальных проблем и получены следующие важные научные результаты: разработана более детальная и строгая теория временной зависимости флуктуации концентрации в растворе и плотности жидкости; предложена теория представлений рассеяния света в жидкости как вращательно-броуновское движение молекул (Физико-технический институт, Россия); предложена простая гидродинамическая модель с несколькими подгоночными параметрами, которые могут быть вычислены на основании макроскопической теории молекул (University of California, США); разработана микроскопическая теория рассеяния света для

[5]Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации составлен на основе: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.journals.aip.org, www.osapublishing.org, www.iop.org, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.opticsinfobase.org, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcorolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu, www.uni-wuppertal.de, www.msu.ru, www.ufn.ru, www.upmc.fr, www.opticjourn.ifmo.ru и других источников.

линейных молекул (Johannes-Gutenberg University, Германия); сильные межмолекулярные взаимодействия ближнего порядка в жидкостях приводят к изменению радиуса корреляций ориентации и положения между ближайшими соседними молекулами (University of Nevada, США).

В настоящее время в мире в сфере исследования природы и силы межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах методами рассеяния света проводятся исследования по ряду направлений, среди которых можно выделить следующие как наиболее приоритетные:

изучение структуры и фазовых переходов веществ с помощью спектров молекулярного рассеяния света; разработка методов определения и высокочувствительного обнаружения температурной зависимости интенсивности крыла линии рэлея в частотном распределении в реальном времени; изучение флуктуационных и структурообразующих явлений вблизи критических точек состояния жидкостей методами спектроскопии изотропного и анизотропного рассеяния света; разработка перспективного метода прогнозирования частот вращательных качаний спектров комбинационного рассеяния света веществ.

Степень изученности проблемы. В настоящее время экспериментальное изучение структуры жидких веществ и температурной зависимости фазовых переходов в них представляет собой обширную область актуальных физических задач.

Теория рассеяния света в жидкостях разработана М. Леонтовичем, Л. И. Мандельштамом, К. А. Валиевым. Релаксационная теория молекулярного рассеяния, разработанная С. М. Рытовым, T. Keys, D. Kivelson, показала, что время релаксации одно- и двухчастичных корреляций различно, но релаксационная флуктуация первичных переменных характеризуется одним временем релаксации, и, следовательно, контур линии рассеяния должен быть простым дисперсионным. Этот результат авторов позволяет объяснить расхождение между временами релаксации анизотропии, определяемыми из рассеяния и других явлений (таких как ядерный магнитный резонанс).

Под руководством члена-корреспондента РАН И. Л. Фабелинского проведено детальное экспериментальное изучение спектров МРС в чистых жидкостях. В этих работах было установлено, что в спектре молекулярного рассеяния вся область протяжения крыла МРС не может быть описана соотношением М. Леонтовича. Выявленный в экспериментах перелом в спектрах в области частот 8–10 $см^{-1}$ приводит к выводу о наличии двух времён релаксации. С помощью измерения времени релаксации маловязких жидкостей установлено, что время релаксации флуктуации анизотропии не совпадает со временем релаксации броуновской сферической частицы в жидкости, т. е. с дебаевским временем релаксации.

Ученые из Узбекистана, в частности академик А. К. Атаходжаев с сотрудниками (Ф. Тухватуллин, А. Жумабоев, У. Ташкенбаев, Ф. Ганиев и др.), проводили исследования молекулярной динамики в жидкой фазе. Измерены контуры деполяризованного рассеяния на различных классах

№-УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по развитию Республики Узбекистан в 2017–2021 годы» от 7 февраля 2017 года, №-ПП-1442 «О приоритетах развития промышленности в 2011–2015 годах» от 15 декабря 2010 года и №-ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также других нормативно-правовых актах по данной деятельности.

Связь исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий республики. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации[5].

Научные исследования в области физики и спектроскопии ММВ конденсированных сред, а также исследования физико-химических процессов, протекающих в различных средах, проводятся в ведущих научных центрах, высших образовательных учреждениях, в том числе в University of California (США), University of Nevada (США), Ohio State University (США), Columbia University (США), Colorado State University (США), Johannes Gutenberg University (Германия), University of Munchen (Германия), University of Bayreuth (Германия), University of Kent (Англия), University of Uppsala (Швеция), University of Tokyo (Япония), Gakushuin University, Tokay University (Япония), Физическом институте имени П.Н. Лебедева (Россия), Физическом институте СО РАН (Россия), Санкт-Петербургском, Уфимском (Россия), Киевском (Украина), Белорусском (Белорусия) государственных университетах, Кемеровском государственном педагогическом институте (Россия), Институте ионно-плазменных и лазерных технологий (Узбекистан), Национальном университете Узбекистана, Самаркандском государственном университете (Узбекистан).

По направлению исследований спектроскопии ММВ конденсированных сред на мировом уровне был решен ряд актуальных проблем и получены следующие важные научные результаты: разработана более детальная и строгая теория временной зависимости флуктуации концентрации в растворе и плотности жидкости; предложена теория представлений рассеяния света в жидкости как вращательно-броуновское движение молекул (Физико-технический институт, Россия); предложена простая гидродинамическая модель с несколькими подгоночными параметрами, которые могут быть вычислены на основании макроскопической теории молекул (University of California, США); разработана микроскопическая теория рассеяния света для

[5]Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации составлен на основе: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.journals.aip.org, www.osapublishing.org, www.iop.org, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.opticsinfobase.org, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcorolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu, www.uni-wuppertal.de, www.msu.ru, www.ufn.ru, www.upmc.fr, www.opticjourn.ifmo.ru и других источников.

молекул (Johannes-Gutenberg University, Германия); сильные межмолекулярные взаимодействия ближнего порядка в жидкостях приводят к изменению радиуса корреляций ориентации и положения между ближайшими соседними молекулами (University of Nevada, США).

В настоящее время в мире в сфере исследования природы и силы межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах методами рассеяния света проводятся исследования по ряду направлений, среди которых можно выделить следующие как наиболее приоритетные:

изучение структуры и фазовых переходов веществ с помощью спектров молекулярного рассеяния света; разработка методов определения и высокочувствительного обнаружения температурной зависимости интенсивности крыла линии рэлея в частотном распределении в реальном времени; изучение флуктуационных и структурообразующих явлений вблизи критических точек состояния жидкостей методами спектроскопии изотропного и анизотропного рассеяния света; разработка перспективного метода прогнозирования частот вращательных качаний спектров комбинационного рассеяния света веществ.

Степень изученности проблемы. В настоящее время экспериментальное изучение структуры жидких веществ и температурной зависимости фазовых переходов в них представляет собой обширную область актуальных физических задач.

Теория рассеяния света в жидкостях разработана М. Леонтовичем, Л. И. Мандельштамом, К. А. Валиевым. Релаксационная теория молекулярного рассеяния, разработанная С. М. Рытовым, T. Keys, D. Kivelson, показала, что время релаксации одно- и двухчастичных корреляций различно, но релаксационная флуктуация первичных переменных характеризуется одним временем релаксации, и, следовательно, контур линии рассеяния должен быть простым дисперсионным. Этот результат авторов позволяет объяснить расхождение между временами релаксации анизотропии, определяемыми из рассеяния и других явлений (таких как ядерный магнитный резонанс).

Под руководством члена-корреспондента РАН И. Л. Фабелинского проведено детальное экспериментальное изучение спектров МРС в чистых жидкостях. В этих работах было установлено, что в спектре молекулярного рассеяния вся область протяжения крыла МРС не может быть описана соотношением М. Леонтовича. Выявленный в экспериментах перелом в спектрах в области частот 8–10 $см^{-1}$ приводит к выводу о наличии двух времён релаксации. С помощью измерения времени релаксации маловязких жидкостей установлено, что время релаксации флуктуации анизотропии не совпадает со временем релаксации броуновской сферической частицы в жидкости, т. е. с дебаевским временем релаксации.

Ученые из Узбекистана, в частности академик А. К. Атаходжаев с сотрудниками (Ф. Тухватуллин, А. Жумабоев, У. Ташкенбаев, Ф. Ганиев и др.), проводили исследования молекулярной динамики в жидкой фазе. Измерены контуры деполяризованного рассеяния на различных классах

жидкостей и найдены времена релаксации анизотропии. В соответствии с релаксационной теорией сопоставляются значения времени вращательной релаксации, определяемые из уширения рэлеевской линии и из двойного лучепреломления. В результате исследований были установлены особенности ММВ и характерные времена релаксации различных механизмов на молекулярном уровне. Под руководством профессора Л. М. Собирова (СамДУ) проводятся работы по экспериментальному изучению флуктуационных и структурообразующих явлений вблизи критических и особых точек состояния жидкостей методами спектроскопии изотропного и анизотропного рассеяния света. В результате этих исследований установлен ряд новых физических явлений.

В Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека под руководством профессора, д.ф.-м.н. Ш. Отажонова проводятся работы по систематическому изучению широкого круга проблем, касающихся зависимости молекулярных спектров от межмолекулярных взаимодействий, и связанных, с одной стороны, с изучением общих соотношений между спектроскопическими свойствами жидкостей и образующих их молекул, а с другой – с количественным исследованием влияния межмолекулярных взаимодействий различной природы на спектры молекул. В результате этих исследований обнаружен ряд новых физических явлений, требующих объяснения. В частности, обнаружен эффект сужения наблюдаемого спектра деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света (ДКМРС) в жидкостях при высоких температурах, нарушение закона зависимости интенсивности рассеянного света от длины волны падающего света, наличие когерентного состояния молекул жидкости при температурах, близких к критическим. На основании совокупности экспериментальных данных по температурному ходу параметров контуров МРС предложена модель теплового движения молекул жидкости.

Связь темы диссертации с научно-исследовательскими работами высшего учебного заведения, в котором выполняется диссертация. Диссертационное исследование выполнено по плану научно-исследовательских работ Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека по теме «Исследование температурной зависимости релаксационных процессов в конденсированных средах оптическими методами» и в рамках международных научных проектов фонда Международной академии наук (TheWorld Academy of Sciences (TWAS)) №15-198 RG/PHYS/AS_I – FR3240287086 «Experimental Study of Relaxation Processes in Anisotropic Liquids: Analysis of Oscillation and Orientation Spectra» (2015-2017), фонда The Matsumae International Foundation в Японии № 16G14 “Study on Molecular Spectroscopy Using Lasers” (сентябрь–декабрь 2016 года).

Цель исследования. Цель данной работы – изучение проявления изменения структуры ароматических углеводородов с метильными и галоидными заместителями и развитие оптических методов анализа, а также

определение физических механизмов релаксационных процессов, связанных с ММВ в спектре излучения.

В соответствии с поставленной целью решались следующие **задачи исследования:**

создание комплекса автоматизированных высокочувствительных экспериментальных установок, позволяющих проводить исследования рассеяния света в широком температурном и частотном интервале;

изучение спектров МРС и КРС в жидкостях, состоящих из молекул разной симметрии в температурном интервале от комнатной до близкой к критической;

установление и оценка вкладов различных механизмов, формирующих контуры МРС и КРС для детализации характера теплового движения молекул жидкости;

изучение влияния природы метильных и галоидных заместителей на колебательную и ориентационную релаксацию;

разработка методики и программного комплекса многокомпонентного анализа вращательных и колебательных спектров и расчета параметров релаксационных процессов по спектрам МРС и КРС;

проведение квантово-химических расчетов структуры, электронного строения и спектроскопических параметров для установления оптимальных конфигураций молекул.

Объектом исследования являются ароматические углеводороды с метильными и галоидными заместителями, различающиеся формой молекул и полярными свойствами, но в то же время исключающие возможные специфические взаимодействия и являющиеся устойчивыми к тепловым и световым взаимодействиям.

Предметом исследования являются процессы межмолекулярных взаимодействий, происходящих в изученных соединениях, динамики флуктуационных процессов под действием температуры и их проявления в спектральном составе рассеянного лазерного излучения.

Методы исследования. В процессе исследования использованы современные теоретические и экспериментальные методы, в том числе спектроскопия молекулярного рассеяния света, спектроскопия комбинационного рассеяния света, модель заторможенного вращения молекул, методы квантово-химических расчетов, пакеты прикладных программ для математического анализа.

Научная новизна исследования заключается в следующих результатах:

получены спектры молекулярного (в области 0–200 $см^{-1}$) и комбинационного (в области 50–5000 $см^{-1}$) рассеяния света в органических жидкостях – углеводородах и их галоидзамещенных производных;

разработана методика определения важнейших молекулярных параметров ММВ, открывающая принципиально новые возможности физики

конденсированных сред при изучении физических свойств многоатомных молекул в разных фазовых состояниях вещества;

впервые предложен оригинальный теоретический способ определения динамического расчета интенсивности МРС в жидкости на основе модификации спектроскопического метода по рассеянию нейтронов;

обнаружено, что распределение интенсивности деполяризованной части МРС в ароматических углеводородах с метильными и галоидными заместителями описывается двумя составляющими контурами – «узкими» и «широкими»;

показано, что динамика сужения спектра анизотропного рассеяния света при приближении к температуре фазового перехода (в области критических температур) «анизотропная жидкость–изотропная жидкость» не описывается рамками теории Френкеля;

впервые показана возможность применения полуэмпирического метода расчётов потенциальных барьеров и установлены спектрально-структурные корреляции по данным квантово-химических расчетов с учетом межмолекулярного взаимодействия в галоидзамещенных бензолах;

обнаружены температурная зависимость потенциального барьера переориентации молекул и проявление вращательных качаний отдельных атомных групп в спектрах низких частот КРС.

Практические результаты исследованиязаключаются в следующем:

разработана методика,заключающаяся в разложении контура ДКМРС на составляющие по степеням свободы молекул, описываемая различными аналитическими зависимостями – лоренцианом, экспонентой с разными показателями степени и расчета его параметров;

разработан теоретический способ динамического расчета интенсивности молекулярного рассеяния света в жидкости на основе спектроскопии нейтронов;

доказан немонотонный ход температурной зависимости интегральной интенсивности деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света;

разработаны цельнотянутые кюветы, выдерживающие высокие температуры и давление, и обосновано, что они могут служить для исследования физических закономерностей вблизи критических структурно-неустойчивых состояний жидкостей.

Достоверность результатов исследования обосновывается тем, что экспериментальные результаты получены с применением современных методов исследования, таких как лазер-раман-спектроскопия, конфокальная микроскопия, методы квантово-химических расчетов, методы математического анализа и математической статистики.

Выводы по работе сделаны на основе полученных результатов по современным теориям динамики и спектроскопии ММВ, молекулярного и комбинационного рассеяния света и результатам квантово-химического моделирования.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследований, полученных по спектрам молекулярного и комбинационного рассеяния света настоящей диссертации, заключается в том, что они расширяют представление о межмолекулярных взаимодействиях, релаксационных процессах, температурной зависимости потенциального барьера переориентаций молекул, а также механизмах резонансного обмена энергии в растворах и способствуют развитию более строгой молекулярной теории жидкого состояния и проведению теоретического анализа структурных изменений, связанных с перестройкой ближнего порядка в жидкости.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что изучение влияния природы метильных и галоидных заместителей на колебательную и ориентационную релаксацию могут быть применены для конкретизации теплового движения молекул и механизмов кинетики физико-химических процессов, для создания строгой теории жидкого состояния, связанной с перестройкой ближнего порядка, а также являются основой для разработки научно обоснованной технологии получения материалов с контролируемыми свойствами для отбора активных сред жидкостных перестраиваемых лазеров.

Внедрение результатов исследования. На основании полученных результатов по спектроскопии межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах и кинетике релаксационных процессов:

разработанные методики разложения контура ДКМРС на составляющие по степеням свободы молекул, описываемые различными аналитическими зависимостями и расчетом их параметров с помощью компьютерного моделирования, были применены при выполнении международного проекта 14-022RG/MATHS/AS_G-UNESCOFR:324028610 «Nonlinear Evolution Equations and Transport on Metric Graphs Arising from Mesoscopic Physics» для определения весов составляющих рассеянных волн в точках простых разветвленных систем (Справка №ФТА-02-11/1358 Агентства по науке и технологии Республики Узбекистан от 26 декабря 2017 года). Использование научных результатов позволило упростить дисперсионные процессы в простых разветвленных системах;

приведенный большой массив данных по МРС и КРС был использован для очистки воды, машинного масла, пищевой рафинировки и идентификации минералов в Университете Бенгкулу (Справка №196104011986031001 Университета Бенгкулу, Индонезия, от 12 июня 2018 года). Использование научных результатов было эффективным при определении примесей в различных жидкостях и жидких фазах;

спектры комбинационного рассеяния света и метод для квантово-химического расчета различных молекулярных параметров на основе независимого подхода были использованы в прикладном гранте А-7-23 «Технология выделения меди из сточных вод отечественными ионообменными сорбентами» для определении углеводородов и их

галоидозамещенных в сточных водах, а также для оценки вероятности химической связи ионов меди в технологических растворах с функциональными группами в ионообменных материалах (Справка №89-03-2779 Министерства высшего и среднего специального образования Республики Узбекистан от 31 июля 2018 года). Использование научных результатов увеличило эффективность определении углеводородов и их галоидозамещенных в сточных водах и позволило заблаговременно оценить связь между ионами меди и ионитами.

Апробация результатов исследования. Основные результаты исследований были апробированы на 24 научно-практических конференциях и симпозиумах, в том числе на 13 международных и 11 республиканских научно-практических конференциях.

Опубликованность результатов исследования. Полученные результаты по теме диссертации изложены в 42 научных трудах, из них 18 – научные статьи, в том числе 10 в зарубежных и 8 в республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы и приложения. Объем диссертации составляет 254 страниц текста, включает 52 рисунка и 15 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обосновываются актуальность и востребованность темы диссертации в соответствии с исследованиями по приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан, дается обзор международных научных исследований по теме диссертации, раскрывается степень изученности проблемы, формулируются цели и задачи, а также объект и предмет исследования, излагаются научная новизна и практические результаты исследования, обосновывается достоверность полученных результатов, раскрывается ее теоретическая и практическая значимость, приведены список внедрений в практику результатов исследования и опубликованных работ, сведения об апробации полученных результатов и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Состояние теоретического и экспериментального исследования спектрального состава молекулярного и комбинационного рассеяния света»** приведен литературный обзор результатов теоретических и экспериментальных исследований спектров МРС и КРС в оптически чистых жидкостях и растворах. Рассмотрены изменение спектра ДКМРС в зависимости от состояния жидкости и вопросы применения спектров МРС для изучения параметров жидкости. Проведен анализ имеющихся литературных данных по вопросам изучения интенсивности и спектрального состава рассеянного

света вследствие флуктуационных явлений и структурной самоорганизации углеродосодержащих молекул, а также механизмов формирования высокочастотной области спектра ДКМРС в жидкостях. Проанализированы работы по изучению вклада внутри- и межмолекулярных взаимодействий и с использованием спектроскопии КРС для изучения вещества в конденсированной фазе.

Во второй главе **«Техника и методика измерения молекулярного и комбинационного рассеяний света в жидкостях»** описаны техника по проведению эксперимента и методика регистрации спектров по исследованию молекулярного и комбинационного рассеяния света в жидкостях в широком интервале частот и при высоких температурах. Выбор объектов исследования главным образом обусловлен, с одной стороны, родственностью их строения (основа – бензольное кольцо), а с другой – различием формы молекул и характера замещения. Приведена методика подготовки оптически чистых образцов исследуемых жидкостей.

Измерения проводились на приборах ДФС-4 для регистрации спектров деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света, ДФС-12 и STR250 Лазерный рамановский спектрометр с методом конфокальной микроскопии для спектров комбинационного рассеяния света в жидкостях.

В третьей главе **«Методика обработки и расчета параметров вращательной и колебательной релаксаций молекул»** приведены методика обработки спектров и расчеты параметров вращательной релаксаций молекул в спектрах деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света. Даны алгоритм решения задачи методом последовательных приближений и разложение экспериментального контура на две лоренцевские составляющие. Дальние участки, начиная с области, где не удается лоренцевская аппроксимация, обрабатывались с помощью экспоненциальных функций. Все полученные данные вводились в компьютер и ещё раз рассчитывались в программе MATLAB.

Приведены методы квантово-химических расчетов структуры, электронного строения и спектроскопических параметров молекул и дана краткая последовательность вывода данных для двух квантово-химических программных пакетов GAUSSIAN и ORCA для сопоставления полученных результатов с экспериментальными данными.

Предложены оригинальные экспериментальные и теоретические способы определения динамических расчетов интенсивности молекулярного рассеяния света на основе модификации спектроскопического метода по рассеянию нейтронов в жидкости.

Рассмотрим жидкость, состоящую из N молекул в объеме V, в которой $\mathbf{R_i}(0)(\mathrm{i} = 1,2,\dots,N)$ означает положение частиц в некоторый начальный момент времени, а $\mathbf{R_i}(t)$– их положение в некоторый другой момент. Введем теперь также средние по гиббсовскому ансамблю, определяемые как

$$G_1(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0},0)=\frac{1}{N}\langle\sum_{1\le i\le N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}-\mathbf{R_i}(t)+\mathbf{R_i}(0))\rangle, \quad (1)$$

$$G_2(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0'},0)=\frac{2V}{N(N-1)}\langle\sum_{1\le i<k\le N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0'}-\mathbf{R_i}(t)+\mathbf{R_k}(0))\rangle, \quad (2)$$

где скобка $\langle\ldots\rangle$ означает усреднение по гиббсовскому ансамблю, отнесенному к начальному (т. е. при $t=0$) состоянию системы. Очевидно, что вследствие изотропности жидкости (и при пренебрежении поверхностными эффектами) будем иметь

$$G_1(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0},0)=G_1(|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|,t),\ G_2(\mathbf{r},t|\mathbf{r_0'},0)=G_2(|\mathbf{r}-\mathbf{r_0'}|,t). \quad (3)$$

Функция $G_1(\mathbf{r},\mathbf{t})$ описывает среднее трансляционное движение одной частицы, ее самодиффузию. Следует отметить, что из-за невозможности точного вычисления функции $G(|r|,t)$ теоретический расчет спектра рассеянного света для жидкостей по последнему выражению пока невозможен. Однако некоторые упрощения возможны для случая разреженного газа. Если полностью пренебречь столкновениями частиц, то G_2 и для G_1 непосредственно из максвелловского распределения скоростей молекул получим

$$G_1(|\mathbf{r}|,t)=\left(\frac{m}{2\pi k_B T t^2}\right)^{1/2}\exp\left\{-\frac{m|\mathbf{r}|^2}{2k_BTt^2}\right\}, \quad (4)$$

где k_B – постоянная Больцмана и T – температура. Подставляя это в выражение для интенсивности, найдем

$$I'_{\text{газ}}(\mathbf{R},\omega)=\frac{\alpha^2\omega^4N}{\pi c^4R^2}I_0\sin^2\gamma\left(\frac{\pi m}{2k_BT}\right)^{1/2}\frac{1}{\varkappa}\exp\left\{-\frac{m(\omega-\omega_0)^2}{2k_BT\varkappa^2}\right\}, \quad (5)$$

а из выражения для интенсивности обратным Фурье-преобразованием можно получить

$$G(|\mathbf{r}|,t)-1=\frac{c^4}{(2\pi)^2\alpha^2}\int d\varkappa\int_{-\infty}^{\infty}d\Omega\, e^{-i(\Omega t-\varkappa r)}S(\varkappa,\omega) \quad (6)$$

или, если проинтегрировать по направлениям $\boldsymbol{\varkappa}$,

$$r\,G(|\mathbf{r}|,t)-1=\frac{2c^4}{(2\pi)^2\alpha^2}\int_0^{\infty}\varkappa d\varkappa\sin\varkappa r\int_{-\infty}^{\infty}d\Omega\, e^{-i\Omega t}S(\varkappa,\Omega). \quad (7)$$

Это выражение непосредственно можно использовать для практических расчетов.

Четвертая глава содержит результаты экспериментального исследования спектра деполяризованного рассеяния света в ароматических углеводородах, и на этой основе анализируется характер ориентационного движения молекул бензола, его производных и четыреххлористого углерода.

Обратная спектральная плотность (т. е. $1/\Im$, здесь $\Im$ – интенсивность) контура ДКМРС в бензоле в функции от квадрата частоты (ν^2) при различных температурах приведена на рис. 1.

Из графика видно, что ДКМРС в интервале частот 0~60 см$^{-1}$ в координатных осях $1/\Im\sim\nu^2$ при комнатной температуре (кривая "**а**") состоит из двух прямых с разными наклонами. Это свидетельствует о том, что контур

ДКМРС в бензоле в интервале частот 0~60 см$^{-1}$ представляет собой суперпозицию двух лоренцевских контуров.

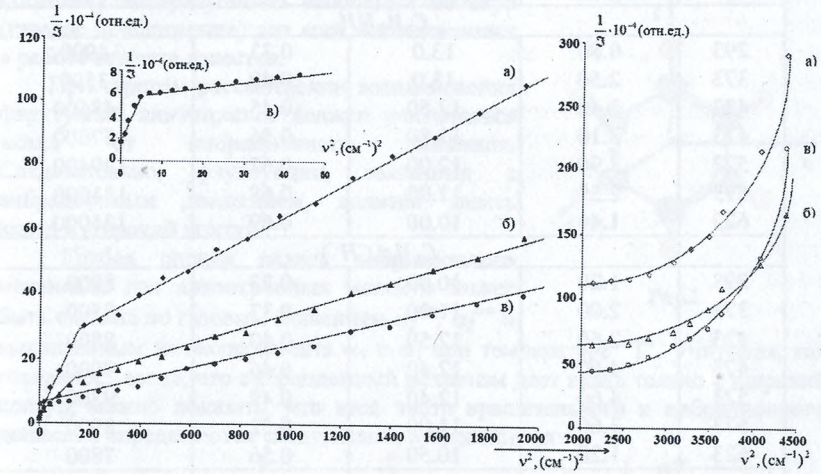


Рис. 1. Обратная спектральная плотность контура линии ДКМРС в молекуле бензола как функция квадрата частоты при температурах 293 К (а); 423 К (б); 553 К (в)

С нагреванием жидкости сложность контура сохраняется, но точка перегиба смещается в низкочастотную область (кривая "**б**") и при температуре 553 К вес узкого контура становится очень малым. Вероятно, в критической точке сложность контура ДКМРС исчезает.

Параметры составляющих контуров для анилина и толуола, определенные в результате аппроксимации экспериментального контура двумя лоренцевскими кривыми в интервале частот 0–60 см$^{-1}$, приведены в табл. 1, где σ_1, σ_2 – полуширины контуров (соответственно «узкого» и «широкого»), α_2 - (α_1=α_2-1) – вес «широкой» составляющей, I – интегральная интенсивность контура.

Для всех исследованных веществ при комнатной температуре в частотном интервале 0~50-60 см$^{-1}$ наблюдаемый контур представляет собой суперпозицию двух дисперсионных контуров – узкого и широкого. Эти представления трактуются с точки зрения модели заторможенного вращения молекул (ЗВМ) жидкости.

В основе модели ЗВМ лежит предположение о независимости вращения молекулы относительно трех главных осей моментов инерции. Из-за различной формы молекул (разной протяженности) и в силу анизотропии внутреннего поля торможение вращения по отдельным осям инерции будет различным. Характер вращения при сильном торможении следует представлять как скачкообразные повороты из одного квазиустойчивого положения в другое.

Таблица 1

T, *K*	σ_1, $см^{-1}$	σ_2, $см^{-1}$	α_2	I, *отн.ед.*
$C_6H_5NH_2$				
293	0.80	13.0	0.33	34900
373	2.50	13.0	0.40	73500
423	3.40	12.50	0.45	148500
473	3.10	11.80	0.56	157000
523	3.90	12.00	0.62	129400
573	2.50	11.00	0.68	131000
623	1.40	10.00	0.69	121000
$C_6H_5(CH\ )$				
293	1.20	10.00	0.33	8000
373	2.00	11.00	0.37	8500
423	2.60	12.50	0.40	8800
473	4.60	12.40	0.46	9000
523	4.60	12.40	0.49	9300
573	3.60	11.00	0.52	8900
623	1.20	10.50	0.56	7800
	±0.1	±1.5	±0.02	5-7%

Если в жидкости существует ближний порядок, то повороту около каждой оси соответствует не только вполне определенная анизотропия, но и в среднем вполне определенная анизотропия поля. Это приводит к тому, что каждому из трех вращений соответствует свое время релаксации, причем возможно большее различие между их значениями. Независимость вращения по трем осям приводит к наличию в спектре анизотропного рассеяния трех дисперсионных кривых с полуширинами $\Delta\nu$, определяемыми величиной "$1/\tau$", где τ – время релаксации анизотропии относительно соответствующей оси. Интенсивность анизотропного рассеяния в «газовом» приближении определяется анизотропией поляризуемости. Следовательно, относительная доля каждого составляющего контура или вес "α_i" в общем рассеянии должны быть пропорциональны анизотропии молекулы в плоскости, перпендикулярной той оси, с вращением относительно которой связан контур. Если оси поляризуемости и инерции совпадают, то

$$\alpha_i = \frac{(a_j - a_k)^2}{(a_i - a_j)^2 + (a_j - a_k)^2 + (a_k - a_i)^2} \qquad (8)$$

(a_i – главные значения тензора поляризуемости молекулы).

Выбор осей представлен на рис. 2.

Из модели ЗВМ вытекают конкретные следствия:

1) контур линии анизотропного рассеяния представляет для асимметричного волчка сумму трех дисперсионных контуров; для симметричного по поляризуемости волчка – сумму двух дисперсионных контуров;

2) появляется возможность оценки весов составляющих контуров "α_i", поскольку поляризуемость свободных молекул (газовое приближение) для всех исследованных в работе веществ известна.

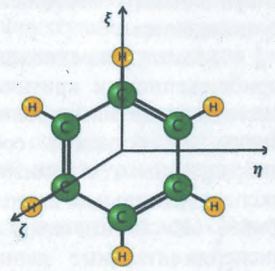


Рис.2.

При строгом рассмотрении возникновения флуктуаций анизотропии должен учитываться вклад от вибрационного движения. Следовательно, флуктуации, связанные с вибрационным движением, должны давать вклад в широкий контур.

Грубая оценка вклада вибрационного механизма для анизотропных молекул может быть сделана по газовым значениям $\alpha_1^{газ}$, $\alpha_2^{газ}$ и вычисленным из эксперимента α_1 и α_2 при температуре "T". Учитывая, как говорилось выше, что вибрационный механизм дает вклад только в широкий контур, можно показать, что веса чисто вращательного и вибрационного движения определяются следующими выражениями:

$$\alpha_{вибр} = \frac{\gamma}{1+\gamma};\quad \alpha_{вращ} = \frac{1}{1+\gamma},\quad \text{где}\quad \gamma = \frac{1}{\alpha_2^{газ}}\left(\frac{\alpha_1^{газ}}{\alpha_1^{э}} - 1\right). \qquad (9)$$

В табл. 2 приведены вычисленные значения $\alpha_{виб}$ и $\alpha_{вращ}$ для нескольких температур в бензоле, бромбензоле, *м*-ксилоле и анилине.

Таблица 2

Бензол							
T, *K*	$\alpha^2_{газ}$	$\alpha^1_{газ}$	$\alpha^2_{экс}$	$\alpha^1_{экс}$	γ	$\alpha_{виб}$	$\alpha_{вра}$
423	0,5	0,5	0,56	0,44	0,27	0,21	0,79
473	0,5	0,5	0,63	0,37	0,70	0,41	0,59
523	0,5	0,5	0,71	0,29	1,45	0,59	0,41
533	0,5	0,5	0,71	0,29	1,45	0,59	0,41
543	0,5	0,5	0,72	0,28	1,57	0,61	0,39
553	0,5	0,5	0,73	0,27	1,70	0,63	0,37
Бромбензол							
523	0,33	0,62	0,41	0,59	0,15	0,13	0,87
574	0,33	0,62	0,5	0,5	0,73	0,42	0,58
625	0,33	0,62	0,58	0,42	1,44	0,59	0,41
м-Ксилол							
573	0,38	0,59	0,47	0,53	0,30	0,23	0,77
593	0,38	0,59	0,51	0,49	0,54	0,35	0,65
603	0,38	0,59	0,53	0,47	0,67	0,40	0,60
613	0,38	0,59	0,55	0,45	0,82	0,45	0,55
Анилин							
423	0,41	0,58	0,45	0,55	0,13	0,12	0,88
473	0,41	0,58	0,49	0,51	0,33	0,25	0,75
523	0,41	0,58	0,54	0,46	0,64	0,39	0,61
573	0,41	0,58	0,6	0,4	1,10	0,52	0,48

Из данных таблицы видно, что с увеличением температуры вклад вибрационного механизма $\alpha_{виб}$ для бензола, анилина становится весьма существенным.

Можно предположить, что с увеличением температуры и приближением к критическому состоянию контур ДКМРС в жидкостях, состоящих из анизотропных молекул, в спектральном интервале 0–60 см$^{-1}$ должен представлять собой одну дисперсионную кривую, связанную с вибрационным механизмом. В пользу такого утверждения говорят и экспериментальные данные по температурному ходу ДКМРС в бензоле при Т=553 К (критическая температура для бензола Т=562,5 К). Эти экспериментальные данные – прямое свидетельство того, что вблизи критического состояния жидкости меняется характер теплового движения молекул жидкости. Вращательные степени свободы молекул «вымораживаются», остаются только вибрационные, причем вибрации, связанные с кооперативным движением молекул.

Анализ полученных данных периферийных участков экспериментального контура выявил, что начиная с ν~60 см$^{-1}$ показывается лучшая аппроксимация для бензола и его производных по затухающей экспоненте в степени *P=2*, т. е. затухание интенсивности в крыльях происходит по гауссиану. Чтобы объяснить механизм происхождения дальних участков крыла рассеяния света в жидкости, мы воспользуемся теорией флуктуации.

Переход флуктуации из одной ямы в другую происходит при изменении структуры ближнего порядка, т.е. этот процесс можно рассматривать как фазовый переход второго рода, в котором меняется не свободная энергия, а энтропия.

Рождение флуктуации происходит в когерентном состоянии, т. е. в сфазированном состоянии, а дальше фаза отдельных молекул должна распределяться равномерно, что достигается за счет процесса диффузии. Если $E(t)$ – функция времени и флуктуация этой функции очень мала, т.е. $\Delta E/E<<1$, то эти поля не могут привести к флуктуациям ориентации, а слегка покачивают молекулы. Это приводит к дефазировке, т. е. к флуктуациям фазы Θ отдельных молекул. Исходя из изложенного выше, уравнение Фоккера–Планка для функции распределения $f(\Theta,t)$, определяющее вероятность реализации значения Θ в момент t

$$\frac{\partial \mathrm{f}}{\partial \mathrm{t}} = K\frac{\partial}{\partial \dot{\Theta}}[\dot{\Theta}] + D\frac{\partial^2 \mathrm{f}}{\partial \dot{\Theta}^2}, \qquad (10)$$

где K – скорость затухания, D – мера мощности случайной силы. Для предельных случаев решение этого уравнения, когда $Kt << 1$, получаемый преобразованием Фурье контур имеет Гауссову форму:

$$\Phi(\omega) = \exp[-\frac{\omega^2}{2D}]. \qquad (11)$$

Флуктуация – это самопроизвольный переход из более вероятного состояния в менее вероятное, т. е. флуктуация – это неравновесное состояние, а неравновесность может порождать порядок. Флуктуация рождается из когерентных частиц, а дальше должна быть равномерность распределения фаз, что достигается за счет процесса диффузии.

Пятая глава **«Результаты экспериментального исследования спектра комбинационного рассеяния света»** служит иллюстрацией огромных возможностей для анализа молекулярной структуры и движения молекул, предоставляемых спектроскопией КРС.

Общий вид спектра в области 1000 см$^{-1}$ КРС для чистых исследованных жидкостей представлен на рис. 3.

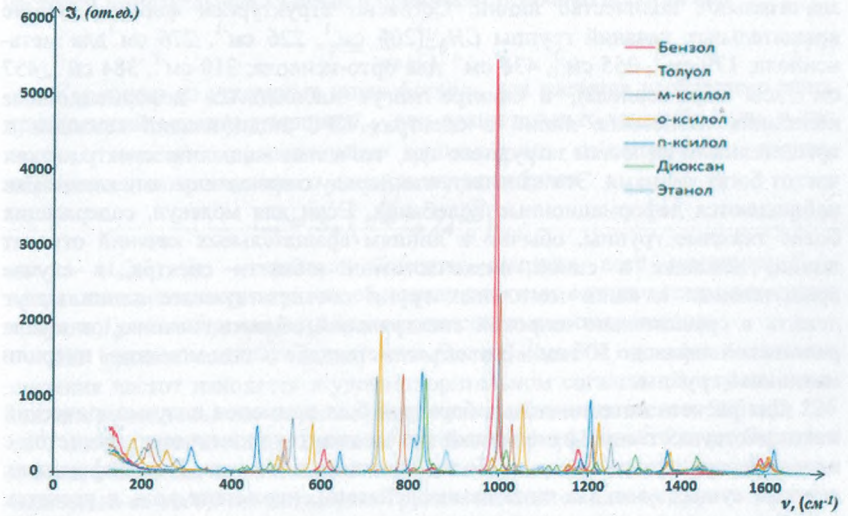


Рис. 3. Обший вид КРС в области 50–1600 см$^{-1}$ для чистых исследованных жидкостей

Согласно нашим экспериментальным данным[6], в чистом бромбензоле полосы КРС спектров колебаний $C-Br$,$C-H$ для толуола, $C-H$ для орта-, мета-, пара-ксилолов, $C-O$ для диоксана и этанола сложные. Для бромбензола можно приближенно выделить четыре интенсивные линии с частотами 177 см$^{-1}$, 310 см$^{-1}$, 998 см$^{-1}$ и 3077 см$^{-1}$.

Наиболее интенсивная линия 3077 см$^{-1}$, на фоне которой лежит линия 3142 см$^{-1}$, сравнительно небольшой интенсивности. Это показывает, что несмотря на принадлежность всех этих линий одному и тому же колебанию $C=H$, коэффициенты деполяризации их разные. При сопоставлении

[6] Эксперименты проводились в научной лаборатории университета Токаи (Япония) в период стажировки автора диссертации с сентября по декабрь 2016 года, за что выражаем им глубокую благодарность.

спектров соединений, обладающих общими структурными признаками, выяснилось, что в ряде случаев наряду с частотами сохраняют свое значение при переходе от одной молекулы к другой и другие параметры линий – интенсивность, ширина и степень деполяризации. Результаты показали, что не всякое разветвление или другая особенность строения молекул, повторяющиеся в ряде близких соединений, приводят к появлению в их спектрах характеристических линий. Лишь некоторые специфические группы атомов или связей (в ряде случаев отдельные атомы и связи) обладают в спектрах комбинационного рассеяния света характеристическими линиями.

В спектрах низких частот метилзамещенных ксилолов было обнаружено значительное количество линий. Согласно структурной формуле, кроме вращательных качаний группы CH_3 (205 см$^{-1}$, 226 см$^{-1}$, 276 см$^{-1}$для мета-ксилола; 179 см$^{-1}$, 255 см$^{-1}$, 436 см$^{-1}$ для орто-ксилола; 310 см$^{-1}$, 384 см$^{-1}$, 457 см$^{-1}$ для пара-ксилола), в спектре могут наблюдаться деформационные колебания. Отнесение линий в спектрах КРС модификаций ксилолов к вращательным качаниям затруднено тем, что в этих жидкостях спектр низких частот богат линиями. Это означает, что наряду с вращательными качаниями наблюдаются деформационные колебания. Если для молекул, содержащих более тяжелые группы, обычно к линиям вращательных качаний относят линии, лежащие в самой низкочастотной области спектра, в случае вращательных качаний метильных групп соответствующие линии могут лежать в сравнительно широкой спектральной области, начиная от крыла рэлеевской линии до 500 см$^{-1}$. Это объясняетсянебольшим моментом инерции метильной группы.

Для расчета потенциальных барьеров был применен полуэмпирический метод, но существенно измененный путем квантово-химических расчетов с целью распространения его на более сложные молекулы. В модификациях ксилола существуют два типа взаимодействий, играющих роль в расчетах подобного рода – взаимодействие химически несвязанных атомов $H \cdots H$ и$C \cdots H$. Для избранных молекул имелись также точные структурные данные (длина связей и углы), определенные методами квантово-химических расчетов.

Расчет показал, что применение для молекул пара, орто, мета-ксилола функции отталкивания между атомами водорода, имеющей вид

$$U = 950{,}5\exp(-1{,}98r) - 1995\exp(-3{,}76r), \qquad (12)$$

без учета взаимодействий других атомов в большинстве случаев даёт удовлетворительное совпадение с экспериментом, где r – расстояние в ангстремах между атомами водорода. Полученные результаты расчета потенциальных барьеров названных веществ и значения частот вместе с данными эксперимента представлены в табл. 3.

Следует подчеркнуть, что значения частот сравнительно малочувствительны к изменению значений высоты потенциальных барьеров.

Таблица 3

Вещество	*U, кал/моль (расчет)*	*ν, см$^{-1}$*	
		расчет	*эксперимент*
Пара-ксилол	4000	291	310
Орто-ксилол	4000	163	179
Мета-ксилол	4000	212	205

Это видно из связи между высотой потенциального барьера U и частотой вращательных качаний ν в случае больших значений U (случай гармонического приближения).

В этом случае связь между высотой потенциального барьера U и частотой вращательных качаний ν принимает особенно простой вид

$$\nu = \frac{3}{2\pi c}\sqrt{\frac{U}{2}}. \qquad (13)$$

Как видно из указанных выше формул, для расчетов необходимо знать приведенный момент инерции $I_{\text{пр}}$ для вращательных качаний. Если у нас имеется молекула вращающейся группы типа симметричного волчка, выражение для приведенного момента инерции будет

$$I_{\text{пр}} = \Im_{\varphi}\left(1 - I_{\varphi}\sum_i \frac{K_i^2}{I_i}\right), \qquad (14)$$

где i– 1,2,3; I_i – главные моменты инерции всей молекулы; K_i – направляющие косинусы углов, образованных осью волчка с главными осями инерции;I_{φ} – момент инерции волчка относительно оси вращения.

Из данных табл. 3 видно, что рассчитанные и экспериментальные значения частот находятся в удовлетворительном согласии. В случае мета-ксилола вращательному качанию может соответствовать частота 205 или 226 см$^{-1}$, так как рассчитанное значение частоты равно 212 см$^{-1}$. Расчет барьеров для пара-ксилола, орто-ксилола и мета-ксилола даёт одинаковые значения барьера из-за того, что метильные группы находятся далеко друг от друга и их атомы водорода не взаимодействуют. Найденные частоты вращательных качаний для этих веществ должны лежать приближенно в одной области.

В этой главе также представлены результаты исследований частотного смещения полосы КРС в растворах толуол+этанол, бензол+диоксан и бензол+этанол в широком интервале концентраций.

На рис. 4 приведены полосы КРС толуола в чистой жидкости и в растворе с этанолом.

Спектры оказались сложными и сильно меняющимися с концентрацией смеси. Результаты экспериментальных исследований частотного смещения $\Delta\nu$КРС света для полосы толуола 2941 см$^{-1}$, для диоксана 2941,59 см$^{-1}$ и для этанола показывают, что во всем исследованном нами интервале концентраций в пределах экспериментальных ошибок наблюдается линейная зависимость величины $\Delta\nu$ от концентраций. Анализ линейной зависимости величины $\Delta\nu$ от концентраций показывает, что разбавление растворителя приводит к сильному уширению линии КРС.

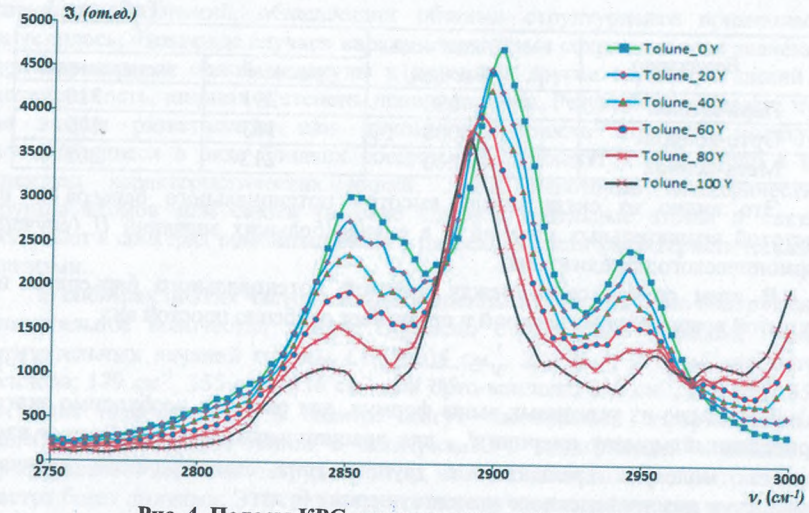


Рис. 4. Полосы КРС толуола в растворе с этанолом

Например, при содержании толуола в смеси 0,8 м.д. ширина этой полосы почти в полтора раза больше ширины полосы чистого этанола.

На рис. 5 приведены экспериментальные результаты по КРС, полученные на лазерном сканирующем конфокальном микроскопе. Они сопоставлены с расчетами, выполненными с помощью неэмпирических квантово-химических методов, т. е. полуэмпирическим пакетом программ ORCA, который представляет собой программный пакет *ab initio* для квантовой химии и содержит современные методы расчетов электронной структуры, включая теорию функциональной плотности (DFT), многомерное возмущение, связанный кластер, многорежимные методы и полуэмпирические методы квантовой химии (SCF-MO).

Хартри–фоковская модель HF/6-31G** оказалась весьма полезной для описания конформаций молекул, определения величины связи атомов, значения углов между ними, которые приведены на рис. 6 в примере для диоксана.

Вычисленные межатомные расстояния получаются заметно меньше экспериментальных значений, когда используются очень большие базисы, которые дают результаты, по точности близкие к хартри–фоковскому пределу. Это объясняется взаимным уменьшением ошибок, связанных с неполным использованием базиса и неучетом электронной корреляции, т.е. квантово-химические расчеты, которые получаются при использовании минимального и валентно-расщепленных базисов, очень хорошо согласуются с экспериментальными данными, а учет электронной корреляции приводит к уменьшению ошибок расчета, так как при этом увеличивается длина валентных связей молекул.

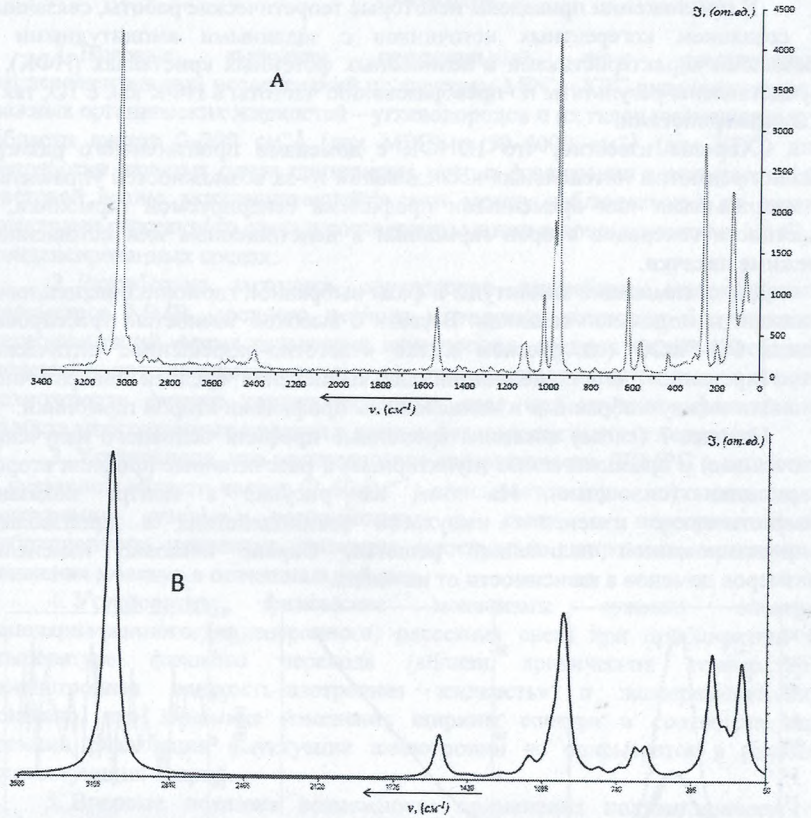


Рис. 5. Зависимость спектральной интенсивности контура линии КРС от частоты для молекул бромбензола: А – эксперимент, В – квантово-химический расчёт

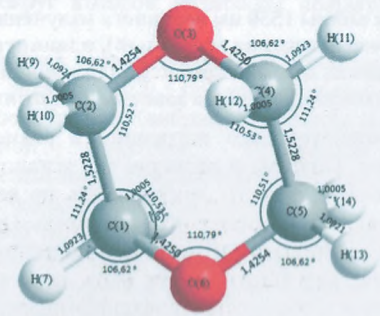


Рис. 6. Длина связи и углы между связями атомов молекулы диоксана

В приложении приведены некоторые теоретические работы, связанные с созданием когерентных источников с заданными амплитудными и фазовыми характеристиками в нелинейных фотонных кристаллах (НФК), и представлены результаты по преобразованию частоты в НФК как с 1D, так и 2D размерностями.

Хорошо известно, что 1DНФК с доменами произвольного размера были предметом интенсивных исследований из-за возможностей управления спектральными или временными профилями генерируемой гармоники, в частности генерации второй гармоники в неистощенном или истощенном режиме накачки.

Для оптимизации амплитуды и фазы выбранной гармоники использован «алгоритм модельной закалки». В связи с высокой точностью трассировки следа PG-FROG (на русском языке «частотно-разрешённое оптическое стробирование») его использовали для вычисления средней квадратичной ошибки между выбранным и вычисленным профилями второй гармоники.

На рис. 7 (слева) показаны временные профили основного излучения (точечные) и предполагаемые (пунктирные) и рассчитанные профили второй гармоники (сплошные). На этом же рисунке в центре показаны энергетические изменения импульсов взаимодействия в произвольно спроектированной нелинейной решетке. Справа показано изменение размеров доменов в зависимости от их числа.

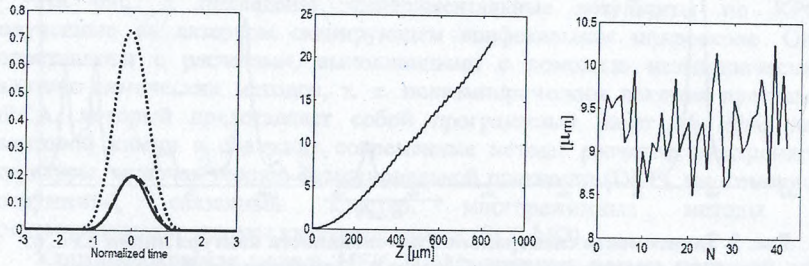


Рис. 7. Результаты алгоритма модельной закалки для 100 фс импульса второй гармоники с эффективностью 20% (в центре) для кристалла ниобата лития при длине волны 1550 нм основного излучения: слева – временной профиль основного излучения (точечный), планируемый (пунктирный) и полученный профиль второй гармоники (сплошной); справа – изменение размеров доменов в зависимости от их числа

Необходимо отметить, что погрешность размеров доменов является важным параметром. Поэтому в расчетах мы установили погрешность 100 нм. Но, как показывают расчеты, погрешность на два порядка больше, чем 100 нм, почти не влияла на результаты расчетов. При этом эффективность преобразования не изменилась с изменением погрешности.

Представленные результаты могут быть использованы для получения фемтосекундных импульсов с запланированными амплитудными и фазовыми профилями.

ВЫВОДЫ

1. Впервые выполнен оригинальный цикл комплексных экспериментальных исследований по спектрам МРС и КРС ряда практически важных органических жидкостей – углеводородов и их галоидозамещенных в области частот 0–200 $см^{-1}$ (для МРС) и 50–5000 $см^{-1}$ (для КРС) для разработки научных основ применения метода флуктуации локального поля световой волны, устанавливающего связь между наблюдаемыми на опыте спектрами рассеянного света и соответствующими закономерностями ММВ в конденсированных средах.

2. Разработана методика определения важнейших молекулярных параметров ММВ (среднего периода и энергии активации броуновских переориентаций, время релаксации анизотропии, средних частот колебаний молекул в потенциальной яме и т.д.), открывающая принципиально новые возможности физики конденсированных сред при изучении физических свойств многоатомных молекул в разных фазовых состояниях вещества.

3. Установлено, что распределение интенсивности ДКМРС в веществе в указанной области частот (0–60 $см^{-1}$) описывается двумя составляющими контурами: «узким», возникающим в связи с переориентацией вибрационного механизма движения молекул, и «широким», вследствие движения молекул в потенциальной яме.

4. Установлены физические механизмы сужения спектра деполяризованного (анизотропного) рассеяния света при приближении к температуре фазового перехода (вблизи критических температур) «анизотропная жидкость–изотропная жидкость» и экспериментально доказано, что динамика изменения ширины спектра и соответственно времени релаксации флуктуации анизотропии не описывается в рамках существующих теорий.

5. Впервые показана возможность применения полуэмпирического метода расчёта потенциальных барьеров метильных групп в галоидозамещенном бензоле. В приближенных расчетах молекулы представляются как состоящие из двух жестких частей, соединенных химической связью, вокруг которой возможны вращательные качания в спектре КРС.

6. На основе анализа высокочастотных участков спектра МРС показано, что на малых временах ($t<0.5$ пс) вращательное движение молекул носит характер легких покачиваний (вибраций) и форма контура МРС лучше описывается Гауссовой функцией, основанной на моделях бесстолкновительной релаксации. Предлагаемый механизм справедлив для любых жидкостей, состоящих из анизотропных молекул.

7. Впервые показано, что с увеличением температуры и приближением жидкости к критическому состоянию область частот перехода центрального лоренциана к гауссиану сдвигается к высоким частотам, что является еще одним подтверждением в пользу гипотезы происхождения высокочастотной

области спектра за счет дефазировки. Установлено, что по форме высокочастотного крыла линии деполяризованной компоненты МРС в жидкости можно получить информацию о фундаментальном явлении статистической физики – фазовом перемешивании.

8. Впервые выполнен расчет различных молекулярных параметров КРС (высота потенциального барьера U, частота вращательных качаний ν, смещения частоты колебания $\Delta\nu$). Показано, что вычисленные значения абсолютных $\Delta\nu$ для всех исследованных объектов находятся в хорошем количественном согласии с экспериментально полученными результатами.

9. Определено, что резонансный перенос энергий, помимо уширения контуров полос в жидкостях с сильными межмолекулярными взаимодействиями, должен вызывать несовпадение положения максимумов полос одного и того же колебания в спектре концентрационного комбинационного рассеяния. Этот эффект несовпадения частот максимума полосы КРС в растворах этанол+толуол и этанол+диоксан ($\Delta\nu$ – отрицательна) и для бензол+диоксан ($\Delta\nu$ – положительна) связаны механизмом резонансного обмена энергией.

10. Впервые доказано, что отнесение частот к вращательным качаниям связано с расчетом высот потенциальных барьеров вращательных качаний. Полученные значения высот потенциальных барьеров имеют самостоятельный интерес в связи с их возможным использованием в термодинамических расчетах. Разработана перспективная методика прогнозирования частот вращательных качаний спектров КРС органических жидкостей.

Выражаем свою огромную благодарность доктору химических наук, профессору Г.И. Мухамедову за оказание научной консультации и поддержку в процессе написания данной диссертационной работы.

SCIENTIFIC COUNCIL No. DSc.30.06.2018.FM/T.65.01 ON AWARD OF SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES

NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN

ESHCHANOV BAKHODIR KHUDAYBERGANOVICH

SPECTROSCOPY OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN CONDENSED MATTERS AND KINETICS OF RELAXATION PROCESSES

01.04.05 – Optics

ABSTRACT OF DOCTORAL DISSERTATION (DSc) ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

TASHKENT – 2018

The theme of the doctoral dissertation (DSc) was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under No.B2017.1.DSc/FM29.

The dissertation has been prepared at the National University of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation was posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website of Scientific council at: http://iplt.uz and on website of the Information and educational portal "ZiyoNet" at: http://www.ziyonet.uz.

Scientific consultant:	**Otajonov Shavkat** Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Official opponents:	**Tashkenbaev Ulugbek Negmatovich** Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
	Doroshenko Irina Yurevna Doctor of Physical and Mathematical Sciences (Ukraine)
	Nematov Sherzod Kalandarovich Doctor of Physical and Mathematical Sciences
Leading organization:	**Samarkand State University**

The defense will take be held on «26» 10 2018 at 14⁰⁰ at the meeting of the Scientific Council No.DSc.30.05.2018.FM/T.65.01 at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (Address: 33 Durmon yoli str. 100125, Tashkent city, Uzbekistan, Phone: (99871) 262-42-54, e-mail: info@iplt.net, Meeting Room of the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies).

The doctoral dissertation (DSc) can be booked through in the Information-resource centre at Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (registered under No. 5) (Address: 33 Durmon yoli str. 100125, Tashkent city, Uzbekistan, Phone: (99871) 262-32-54.

The abstract of the dissertation was distributed on «10» 10 2018.

(Registy record No. 5 on «10» 10 2018)

Kh.B.Ashurov
Chairman of the Scientific Council on award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher

D.T.Usmanov
Scientific Secretary of the thev Scientific Council on Award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher

B.E. Umirzakov
Chairman of the scientific seminar under the the Scientific Council on award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

INTRODUCTION (abstract of DSc dissertation)

The aim of the research was to study the manifestation of a change in the structure of aromatic hydrocarbons with methyl and halogen substituents and the development of optical methods for analysis, as well as the determination of the physical mechanisms of the relaxation processes associated with the intermolecular interactions (IMI) in the radiation spectrum.

The object of the research are aromatic hydrocarbons with methyl and halogen substituents, differing in the form of molecules and polar properties, but at the same time excluding possible specific interactions and being resistant to thermal and light interactions.

The scientific novelties of research work consists of the following:

Spectra of molecular scattering (in the range 0-200 cm^{-1}) and Raman scattering (in the range 50-5000 cm^{-1}) of light in organic liquids - hydrocarbons and their halogenated derivatives have been obtained;

A method has been developed for determining the most important molecular parameters of the IMI, which opens up fundamentally new possibilities for the condensed matter physics in the study of intermolecular interactions and the physics and chemistry properties of complex molecules in different phase states of matter;

For the first time, based on the modification of the spectroscopic method for neutron scattering in liquids, an original theoretical method for determining the dynamic calculation of the intensity of the molecular light scattering (MLS) has been proposed;

It was found that the distribution of the intensity of the depolarized part of MLS in aromatic hydrocarbons with methyl and halogen substituents is described by two constituent contours, "narrow" and "wide";

It was shown that the dynamics of narrowing for the anisotropic light scattering spectrum as the phase transition temperature approaches (in the region of critical temperatures) an "anisotropic liquid-isotropic liquid" is not described within the framework of Frenkel's theory;

For the first time the possibility of applying a semiempirical method for calculating potential barriers in halogen-substituted benzenes has been shown and spectral-structural correlations has been established on quantum chemical calculations taking into account intermolecular interaction;

The temperature dependence of the potential barrier of molecular reorientations and the manifestation of the rotational oscillations of individual atomic groups in the low-frequency Raman spectra have been found.

Implementation of the research results. On the basis of the obtained results on the spectroscopy of intermolecular interactions in condensed matters and the kinetics of relaxation processes:

the developed methods for decomposing the DKMLS contour into components of the molecular degrees of freedom, described by various analytic relations and the calculation of their parameters by computer simulation, were used

in the international project 14-022 RG/MATHS/AS_G – UNESCO FR: 324028610 «Nonlinear evolution equations and transport on metric graphs arising from mesoscopic physics» to determine the weights of scattered wave components at the points of simple branched systems (Certificate No.FTA-02-11 / 1358 of the Agency for Science and Technology of the Republic of Uzbekistan of December 26, 2017). The use of the scientific results made it possible to simplify dispersion processes in simple branched systems;

A great number of data on MLS and Raman scattering in the dissertation was applied for water purification, engine oil refining, food refining and mineral identification at the University of Bengkulu (Certificate No.196104011986031001 of the University of Bengkulu in Indonesia of 12.06.2018). The use of scientific results was very effective in determining impurities in various liquids and liquid phases;

Raman spectra and the method for quantum chemical calculation of various molecular parameters on the basis of an independent approach were used in the implementation of applied grant A-7-23 "Technology of copper separation from wastewater by domestic ion-exchange sorbents" to determine the hydrocarbons and their halogenations in wastewater, as well as to assess the probability of chemical bonding of copper ions in technological solutions with functional groups in ion-exchange materials (Certificate No. 89-03-2779 of the Ministry of Higher and Secondary Specialized Education of the Republic of Uzbekistan of July 31, 2018). The use of the scientific results has increased the efficiency of the determination of hydrocarbons and their halogenations in wastewater, and made it possible to estimate in advance the relationship between copper ions and ion exchangers.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation was presented on 254 pages consisting of an introduction, five chapters, 52 figures, 15 tables, a conlusion, references and an appendix.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (Часть I, Part I)

1. Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A. On Possible Models of Thermal Motion of Molecules and Temperature Effect on Relaxation of Optical Anisotropy in Bromine Benzene //Ukraine Journal of Physics, 2011, Vol.56, No.11, pp.1178–1181 (01.00.00; №51).

2. Otajonov Sh., Eshchanov B., Isamatov A. Manifestation if Substance Molecular Structure in Temperature Effects of Light Scattering //Journal of Chemistry and Chemical Engineering,2013,vol.7. No.8. pp. 791–795 (5. Global Impact Factor; IF=0.654).

3. Эшчанов Б.Х., Отажонов Ш., Исаматов А. Структурные изменения в жидком парадибромбензоле //Узбекский физический журнал, 2014, том 6, №2,с.134-137 (01.00.00; №5).

4. Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A. Studyof Molecular Dynamics of Condensed States of a Substance by Spectroscopy //Ukraine Journal of Physics, 2014, vol.9, No.3, pp.254–256 (01.00.00; №51).

5. Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A., Babajanov D. Dynamics of Relaxation Processes in Liquids: Analysis of Oscillation and Orientation Spectra //Journal of Molecular Liquids, 2015, vol.202, pp.148–152 (40. ResearchGate; IF=2.85).

6. Eshchanov B., OtajonovSh., Solieva N., IsamatovA. Intensity Distribution in the Spectrum of Molecular Light Scattering and Relaxation Effects in Liquids //Ukraine Journal of Physics,2015, vol.60, No.8, pp.792–795 (01.00.00; №51).

7.Sapaev U.K., Eshniyazov V.E., Eshchanov B.Kh., Yusupov D.B. Femtosecond Pulse Shaping via Engineered Nonlinear Photonic Crystals // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2015, vol.6, No.2, pp.244–248 (01.00.00; №5).

8. Eshniyazov V. E., Eshchanov B. Kh., Yusupov D. B., Ergashev Q. Ya., Sapaev U. K. On Theory of Second Harmonic Generation in 2DNonlinear Photonic Crystals with Arbitrary Structures //Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2015,vol.6, No.6, pp.779–785 (01.00.00; №5).

9. Эшчанов Б., Солиева Н., Отажонов Ш. Температурный ход параметров линий комбинационного рассеяния света в жидкостях //Узбекский физический журнал, 2016, том 18, №1, с. 72–74 (01.00.00; №5).

10. Eshniyazov V. E., Eshchanov B. Kh., Yusupov D. B., Ergashev Q. Ya., Sapaev U. K. On Theory of Second Harmonic Generation in 2D Nonlinear Photonic Crystals with Arbitrary Domain Structures //Physics of Wave Phenomena, 2016, vol.24, No.4, pp. 268–271 (40. ResearchGate; IF=0.55).

11. Eshchanov B. The Role of Molecular Structure in Temperature Effects of Light Scattering in Liquids // Journal of Scientific and Engineering Research, 2017, vol. 4. No.12, pp. 445–449 (5. Global Impact Factor; IF=0.543).

12. Eshchanov B., Otajonov Sh.,Rakhmatullaeva Kh. Application of Raman Scattering of Light to Study the Structure of Molecules //International Journal of Scientific & Engineering Research,2018, vol. 9, No.5, pp.1532–1534 (5. GlobalImpactFactor; IF=0.987).

13. Отажонов Ш., Айвазова А.А., Эшчанов Б.Х. О вибрационных механизмах молекул жидкости при высоких температурах // Вестник Национального университета Узбекистана, 2002, №1, с.24–26 (01.00.00; №8).

14. Отажонов Ш., Айвазова А. А., Эшчанов Б. Х., Исаматов А. Динамика релаксационных процессов в анизотропных жидкостях по данным колебательной и ориентационной спектроскопии // Вестник Национального университета Узбекистана, 2004, №3, с.95–98(01.00.00; №8).

15. Айвазова А. А., Отажонов Ш., Эшчанов Б. Х., Исаматов А., Имомов М. О возможных моделях теплового движения молекул жидкостей //Вестник Национального университета Узбекистана, 2005, №3, с.29–31 (01.00.00; №8).

16. Эшчанов Б. Х.Исследование релаксационных процессов в некоторых жидкостях методом молекулярного рассеяния света //Вестник НУУз, 2005, №3, с. 43–55 (01.00.00; №8).

17. Отажонов Ш., Эшчанов Б. Х., Исаматов А. О возможных механизмах возникновения флуктуаций анизотропии и их вкладах в контур деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света в жидкостях // Вестник Национального университета Узбекистана, 2009, №3, с.44–48 (01.00.00; №8).

18. Отажонов Ш., Эшчанов Б. Х., Исаматов А., Элбоева М., Солиева Н., Иззатуллаева М. Проявление молекулярной структуры вещества в температурных эффектах рассеяния света // Вестник Национального университета Узбекистана, 2013, №2/1, с.19–22 (01.00.00; №8).

II бўлим (Часть II, Part II)

19. Отажонов Ш., Айвазова А. А., Эшчанов Б. Х. О роли теплового движения молекул жидкости в формирование контура деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света / Материалы Второй национальной конференции по молекулярной спектроскопии. Самарканд, 8–10 октября 2001, с. 19.

20. Эшчанов Б.Х., Айвазова А.А., Отажонов Ш., Исаматов А., Эгамбердиев К. Деполяризованное рассеяние света и поворотное движение молекул в хлорбензоле / Труды научно-практического семинара «Лазерная физикаи прикладные аспекты лазерной физики». Ташкент, 7 декабря 2004, с. 68–70.

21. Отажонов Ш., Айвазова А.А., Эшчанов Б.Х. Спектроскопические исследования межмолекулярного взаимодействия в мягких средах методом молекулярного рассеяния света / Материалы Третьей международной конференции по молекулярной спектроскопии. Самарканд, 29–31 мая 2006, с. 17–18.

22. Эшчанов Б. Х., Отажонов Ш., Айвазова А.А., Исаматов А., Эгамбердиев К., Болтаев Г. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий в

конденсированных средах и свойства многоатомных органических молекул / Материалы Республиканской конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики». Ташкент, 18-19 мая 2007, с. 54-55.

23. Отажонов Ш., Айвазова А. А., Хабибуллаев П. К., Эшчанов Б. Х., Исаматов А. С. О возможности наблюдения когерентного состояния в жидкостях по деполяризованной компоненте молекулярного рассеяния света / Материалы республиканской конференции «Оптические методы в современной физике». Ташкент, 7-8 мая 2008, с. 30–32.

24. Эшчанов Б.Х., Айвазова А.А., Отажонов Ш., Исаматов А., Эгамбердиев К. Деполяризованное рассеяние света и влияние температуры на релаксацию оптической анизотропии в жидком бензоле/ Материалы Республиканской конференции «Оптические методы в современной физике». Ташкент, 7-8 мая 2008, с. 47–49.

25. Эшчанов Б. Х., Айвазова А. А., Отажонов Ш., Исаматов А. Деполяризованное рассеяние света и поворотное движение молекул в паразамещённых бензола / Материалы научно-практической конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики». Ташкент, 30-31 мая 2008, с. 14–24.

26. Eshchanov B.Kh., Otajonov Sh., Ayvazova A.A., Isamatov A. On the Possibility of Observing Coherent Status in Fends of Depolarized Component of Molecular Scattering of Light / XIX Galyna Puchkovska International School-Seminar «Spectroscopy of Molecules and Crystals», September 20–27, Crimea, Ukraine, pp. 65-66, 2009.

27. Эшчанов Б., Отажонов Ш., Айвазова А.А., Исаматов А. Ориентационная релаксация молекул диоксана и пара-дихлорбензола по спектрам рассеяния света / Материалы Республиканской конференции «Современная физика и её перспективы». Ташкент, 12-13 мая 2009, с. 34–37.

28. Эшчанов Б.Х., Отажонов Ш., Исаматов А., Элбоева М. Температурные зависимости деполяризованной компоненты молекулярного рассеяния света в сероуглероде / Материалы II Республиканской научной конференции «Актуальные проблемы современной физики и астрономии». Карши, 21 мая 2010, с. 9-10.

29. Eshchanov B. Kh., Otajonov Sh., Isamatov A. Spectroscopic Studies of Depolarized Light Scattering and Temperature Effect on Optical Anisotropy Relaxation in Soft Media / The 9th Joint Uzbek-Korea Symposium Nanoscience: Problems and Prospects Quantum Functional Materials and Devices, November 2–5, Tashkent, p.22, 2010.

30. Eshchanov B. Kh., Otajonov Sh., Isamatov A. On Temperature Dependence of Contour Shape of Combinational and Molecular Scattering of Light in Para-dichlorobenzene / XX Galyna Puchkovska International School-Seminar «Spectroscopy of Molecules and Crystals», September 20–27, Crimea, Ukraine, pp.71-72, 2011.

31. Эшчанов Б. Х., Отажонов Ш., Исаматов А., Иззатуллаева М. Структурные изменения в жидком дибромбензоле / IVМеждународная конференция по актуальным проблемам молекулярной спектроскопии конденсированных сред. Самарканд, 29–31 мая 2013, с. 17.

32. Eshchanov B. Kh., Otajonov Sh., Isamatov A. Study of Intermolecular Dynamics of Condensed States of a Matter by Orientation Spectroscopy Methods / XXI Galyna Puchkovska International School-Seminar «Spectroscopy of Molecules and Crystals», September 22–29, Crimea, Ukraine, p. 95, 2013.

33. Eshchanov B.Kh., Otajonov Sh., Isamatov A. Solieva N. Study of Molecular Dynamics in Liquid p-Dibrombenzene by Vibrational and Orientational Spectroscopy / 6-th International Conference «Physics of Liquid Matter: Modern Problems», May 23–27, Kyiv, Ukraine, p. 64, 2014.

34. Eshchanov B. Kh., Otajonov Sh., Solieva N., Allaberganov I. Temperature Dependence Parameters of the Lines Raman Light Scattering in Dioxane / XXII Galyna Puchkovska International School-Seminar «Spectroscopy of Molecules and Crystals», September 27-October 4, Zakarpattia, Ukraine, p. 200, 2015.

35. Эшчанов Б., Отажонов Ш., Солиева Н., Оллаберганов И. Влияние межмолекулярных взаимодействий на интенсивности колебательных спектров / Материалы III Республиканской научной конференции «Актуальные проблемы современной физики и астрономии». Карши, 23 мая 2015, с. 10–12.

36. Eshchanov B., Otajonov Sh. Spectroscopic Study of Intermolecular Dynamics and Energy Distribution in Molecular Scattering of Light from Organic Liquids / 7-th International Conference «Physics of Liquid Matter: Modern Problems», May 27-30, Kyiv, Ukraine, p. 199, 2016.

37. Эшчанов Б., Отажонов Ш., Абдужабборова У. Температурные эффекты параметров молекулярного рассеяния света в пара-ксилоле / Материалы Республиканской конференции «Оптические методы в современной физике». Ташкент, 27-28 мая 2016, с. 49–52.

38. Эшчанов Б.Х., Отажонов Ш. Модель заторможенного вращения молекул для изучения структуры жидкости / V Международная конференция по актуальным проблемам молекулярной спектроскопии конденсированных сред. Самарканд, 22-24 сентября 2016, с. 15–17.

39. Otajonov Sh., Eshchanov B., Eshnazarov W. A New Approach to Coherent Manifestation Properties of Fluids According to the Spectrum of Depolarized Light Scattering / International Symposium «New Trends of Development Fundamental and Applied Physics: Problems, Achieves and Prospects», November 10-11, Tashkent, p. 53, 2016.

40. Эшчанов Б.Х., Отажонов Ш. Изучение межмолекулярной динамики конденсированных состояний вещества методами колебательной спектроскопии / Материалы Республиканской конференции «Современные проблемы физики». Ташкент, 14 октября 2017, с. 39-40.

41. Eshchanov B. Structural Changes in Aromatic Liquids with a Change in Temperature / 30-th Scientific Federation Conference on Laser Optics & Photonics, June 19–21, Valencia, Spain, p. 71, 2017.

42. Eshchanov B., Otajonov Sh. Dynamics of Vibrational Spectra and Interaction of Molecules in Liquids / XIII Galyna Puchkovska International School-Seminar «Spectroscopy of Molecules and Crystals», September 20–25, Kyiv, Ukraine, p. 40, 2017.

Автореферат “Тил ва адабиёт таълими” журнали таҳририятида таҳрирдан ўтказилди (24.09.2018 й.)

Босишга рухсат этилди 08.10.2018. Ҳажми 3.75 босма табоқ.
Бичими 60×84 1/16. Адади 80 нусха. Буюртма 181.
М.Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий Университети
босмахонасида чоп этилди.