

Ешимбетов Алишер Гулумбаевич

ИҚ-спектроскопия усулидан амалий қўлланма

*Тақризчилар: СамДУ доценти, ф-м.ф.н. А. Куватов
ЎзФА ЎМКИ катта и.х., к.ф.н. Х. Хўжаниязов*

Тошкент-2014

СамДУ доценти, ф-м. ф.н. А. Қуватовга
ҳамда ЎзФА ЎМКИ катта илмий ходими,
к.ф.н. Х. Хўжаниязовга қимматли вақтларини
аямасдан қўллангани ўқиб чиққанликлари ва
билдирган маслаҳатлари учун чуқур
миннатдорчилик билдираман.

Глоссарий

A, absorbance - ютилиш кўрсаткичи, яъни оптик зичлик: $A = \lg(I_0/I)$; A- оптик зичлик, I_0 -намунага тушаётган нур интенсивлиги, I-намунадан ўтган нур интенсивлиги.

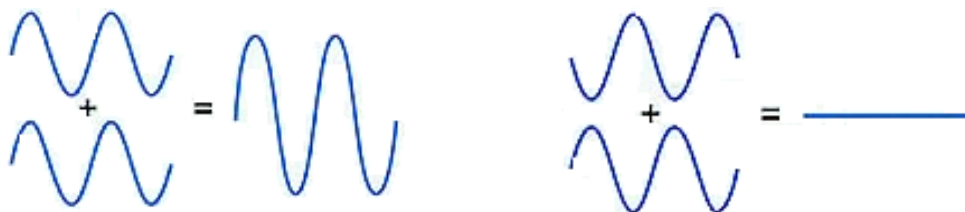
T, transmittance- ўтказиш кўрсаткичи, коэффициенти: $T(\%) = (I/I_0) \cdot 100$

KRS5 - таллий бромид ва йодидлар аралашмасининг кристаллари (44% TlBr +56% TlI).

KBr-ли таблеткалар –майдаланган, кукун холидаги намуналарнинг KBr кукуни билан 1:80 (1:100) нисбатда аралаштириб пресс-формада олинган таблеткаларидир.

Вазелин -нефтнинг юқори температурада қайновчи фракцияси бўлиб, асосан тўйинган углеводородлардан таркиб топган (ўртача таркиби C_{25}). Чет эл адабиётларида «paraffin» - нуйол деб юритилади. Ундан аморф ва қаттиқ моддаларнинг суспензияси тайёрланиб ИҚ-спектри олинади. Аммо, унинг асосий камчилиги СН боғининг валент ($2800-3000 \text{ см}^{-1}$) ва деформацион ($1350-1500 \text{ см}^{-1}$) тебранишлари туфайли юзага келган интенсив соҳалар намунанинг СН боғи ҳақида маълумот олиш имконини чегаралайди.

Интерференция ходисаси – ёруғлик тўлқинларининг қўшилиши натижасида ҳосил бўладиган ҳодиса, бундай қўшилиш натижасида қўшилган нурнинг интенсивлиги қўшилувчи нурлар интенсивликларининг йиғиндисидан кўп ёки оз бўлиши мумкин.



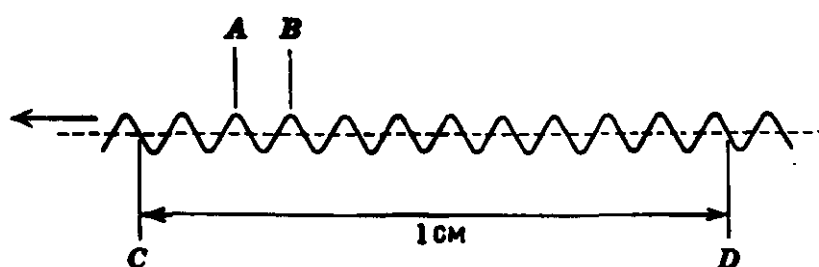
Обертон – тебраниш сатҳлари орасидаги тақиқланган ўтишлар туфайли юзага келган ютилиш полосалари. Одатда обертон полосаларининг частоталари асосий частоталардан 2, 3 баробар катта интенсивлиги эса паст бўлади. Масалан $C=O$ гуруҳ валент тебранишининг асосий частотаси тақрибан 1700 см^{-1} , шу полоса биринчи обертони эса частотаси тақрибан 3400 см^{-1} бўлган интенсивлиги паст полоса шаклида кузатилади.

Полоса – ютилиш соҳаси (чизиғи). Атомларнинг спектри чизикли бўлади, молекулаларники эса чизиклар йиғиндисидан (йўлаклардан) иборат. Инглиз тилида *band* дейилади.

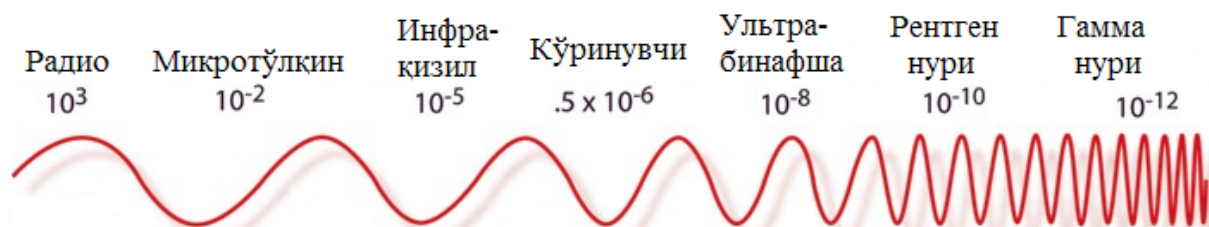
Скан – инглизча сўз, диққат билан ўрганиб чиқиш, қараб чиқиш деган маънони билдиради. Асбоб ускуналарда «record spectrum» (спектрни ёзиш) сўзининг ўрнига «scan» ишлатилмоқда.

Спектр – лотинча «spectrum» сўзидан олинган бўлиб, кўринувчи деган маънони билдиради. Ёруғлик нурунинг призмадан ўтиши натижасида кўринувчи рангларга ажралиб, камалак ранглар кетма-кетлигини ҳосил қилишини Исаак Ньютон (1672 й.) спектр деб атаган.

Тўлқин сони ν , см^{-1} – 1 сантиметр масофада (С ва D орасидаги) жойлашган тўлқинлар сони. АВ-тўлқин узунлиги λ .



Тўлқин узунлиги бўйича спектр соҳалари (тўлқин узунлиги -метрда)



Тўлқин ва энергетик параметрлар орасидаги боғлиқлик:

тўлқин сонидан тўлқин узунлигига ўтиш: λ (нм) = $10^7/\nu$ (см^{-1});

тўлқин узунлигининг энергиясини топиш (ккал/моль): $E = 28591.2/\lambda$ (нм);

тўлқин узунлигининг энергиясини топиш (эВ): $E = 1239.81/\lambda$ (нм);

тўлқин сони энергиясини топиш (эВ): $E = 0.123981 \cdot 10^{-3} \cdot \nu$ (см^{-1});

Юқори ва қуйи частотали силжиш – ютилиш полосасининг спектрнинг юқори частотали соҳасига (қисмига) (4000 см^{-1} томонга) қараб силжиши, юқори частотали силжиш, 400 см^{-1} томонга қараб силжиши эса қуйи частотали силжиш дейилади.

Кириш

Физикавий тадқиқот усуллари, шу жумладан ИҚ-спектроскопия усули бўйича адабиётлар жуда кўп ва улар ўз соҳасида ҳозиргача тенгсиз ҳисобланади. Аммо бу адабиётларнинг бирортаси ўзбек тилига таржима қилинмаган. Шунингдек, ушбу адабиётларда техник томондан эскирган асбоб ускуналар тавсифлаб берилган. Янги, замонавий спектрометрларнинг тузилиши, ишлаш принципи, имкониятлари ҳақидаги қисқача маълумотни ва шу билан биргаликда ИҚ-спектрларни таҳлил қилиш бўйича қисқача маълумотларни илмга чанқоқ бакалавр ва магистрларимизга етказиш мақсадида ушбу кичик қўлланма тузилди.

Янги, замонавий асбоблардан бири Perkin-Elmer фирмасининг System-2000 Фурье-ИҚ-спектрометри мустақиллигимизнинг дастлабки 5-йиллиги арафасида Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академиясининг Ўсимлик моддалари кимёси институтига келтирилган. Ушбу қўлланмада келтирилган ИҚ-спектрлар шу спектрометрда олинган.

ИҚ-спектроскопия усули ва гуруҳларнинг характеристик ютилиш частоталари

Эндигина илмий изланишларни бошлаган бакалавр ёки магистрлар ўзлари ажратиб олган ёки синтез қилган моддаларининг таҳлили билан жуда қизиқишади ва айрим ҳолларда фақат ИҚ-таҳлили асосида моддаларнинг структурасини тўлиқ аниқлаб беришни сўрайди! ИҚ-таҳлили асосида камдан кам ҳоллардагина модда структурасини аниқлаш мумкин. Бунинг учун сизда стандарт бўлиши керак ёки ИҚ-спектрометр янги, замонавий спектрлар кутубхонаси билан таъминланган бўлиши шарт. Спектрлар кутубхонасида сақланаётган, кенг тарқалган ва кўп ишлатиладиган маълум моддаларнинг ИҚ-спектрларини тадқиқ қилинаётган модданинг ИҚ-спектри билан таққослаш асосида маълум моддага ўхшашлик фоизини чиқариб беради холос. Бу манбага сиз ажратиб олган ёки синтез қилган моддангиз киритилмаган бўлиши мумкин. Стандарт яъни олдин олинган ва структура тузилиши тўлиқ ўрнатилган модда ёрдамида намунанинг стандартга қанчалик даражада ўхшашлигини сифат ва ярим микдорий жиҳатдан баҳолаш мумкин.

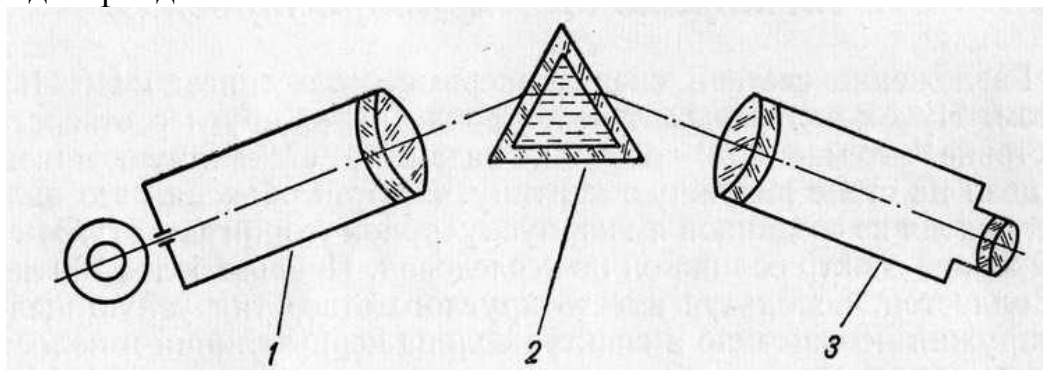
Бундан ташқари, реакциянинг қандай бориши ва қанақа реакция маҳсулоти ҳосил бўлиши назарий жиҳатдан маълум бўлса, дастлабки моддалар ва реакция маҳсулотининг ИҚ-спектрларини таққослаш асосида кутилган натижага эришилганлигини ёки эришилмаганлигини баҳолаш мумкин.

Агар, реакция натижасида қандай модда ёки моддалар ҳосил бўлиши номаълум бўлса ёки ўсимликдан ажратиб олинган янги модда дастлабки физик-кимёвий кўрсаткичлари бўйича маълум бирикмалардан фарқ қилса ва шунга ўхшаш бошқа ҳолатларда намунанинг 4000 см^{-1} дан 400 см^{-1} гача

(тўлқин узунлигининг $10^{-6} - 10^{-3}$ м) бўлган соҳада жойлашган ИҚ-спектрини таҳлил қилиш орқали қандай функционал гуруҳлар мавжудлигини ва намунанинг қайси синфга оидлиги ҳақида хулосалар қилиш мумкин.

Маълумки, микрооламдаги кузатишлар макрооламдаги кузатишлардан кескин фарқ қилади. Масалан, макрооламда арининг уясида бўлаётган ҳодисаларни кўз билан қараб кузатиш мумкин. Микрооламда эса кузатиш, ўрганилаётган модда билан унга таъсир қилаётган турли частотали «нур»ларнинг (рентген, ультрабинафша, кўринувчи, инфрақизил, радиотўлқинлар ва б.) ўзаро таъсирини ўрганувчи мураккаб асбоб – спектрометр ёрдамида олиб борилади.

Адабиётларда келтирилишича, дунёда биринчи спектрал таҳлил 1859 йил Бунзен ва Кирхгоф томонидан амалга оширилган. Улар ўзлари ясаган спектроскоп орқали ош тузини горелка оловига тутиб, натрийнинг чиқариш спектрини кузатишган. Улар томонидан ясалган спектроскоп 1-расмда келтирилган: 1-коллиматор; 2-призма ва 3-саккиз марта катталаштириб кўрсатадиган кузатиш найчаси. Нур манбаи сифатида Бунзен ясаган горелкадан фойдаланишган.

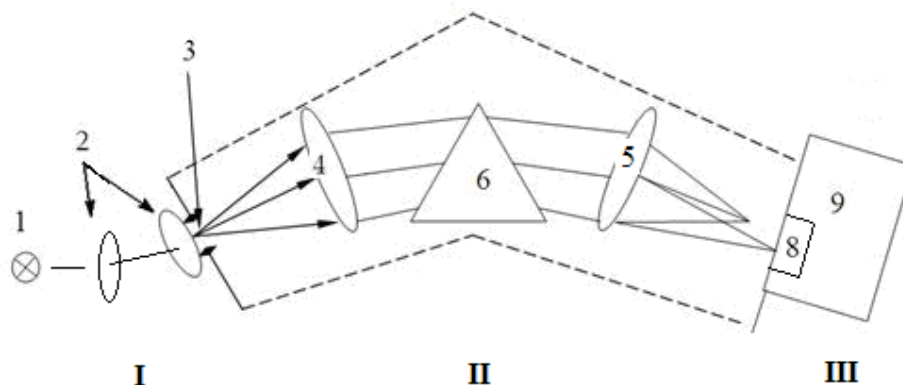


1-Расм. Бунзен ва Кирхгоф ясаган спектроскопнинг схемаси.

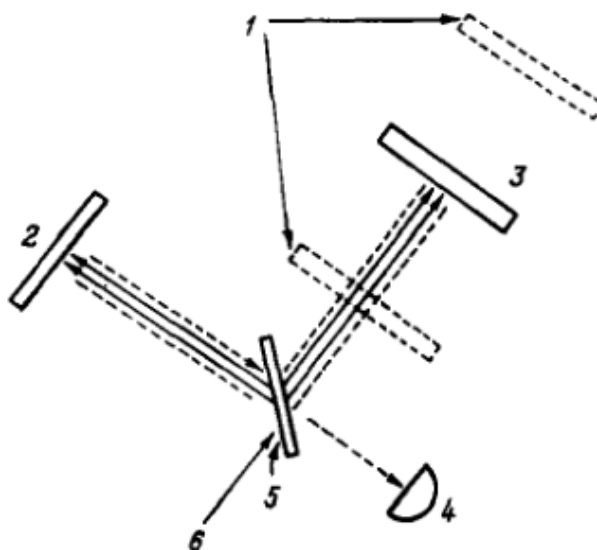
Ўтган асрнинг 40-50 чи йилларидан бошлаб анча мукаммал, автоматик равишда спектрни қайд қиладиган ИҚ-спектрофотометрлар яратилди. Бу турдаги спектрофотометрлар асосан уч қисмдан ташкил топган (2-расм). **I** – ёритувчи қисм; **II**-оптик (спектрал) қисм; **III**-қабул қилувчи ва қайд қилувчи қисм.

Олдинги ИҚ спектрофотометрларда нурни монохроматлаш учун натрий хлориддан ясалган призма ишлатилган (2-расм). Бундай призмалар гигроскопик бўлганлиги туфайли кейинчалик уларнинг ўрнига дифракцион панжаралар ишлатила бошлади.

Замонавий, лазер қурилмаси ўрнатилган фурье-спектрометрлар бир тирқишли бўлиб, уларда монохроматор ишлатилмайди ва усқунанинг асосий элементи Майкельсон интерферометри (модулятори) ҳисобланади. Майкельсон интерферометри ҳаракатчан ва ҳаракатсиз кўзгу ҳамда нурни бўлувчи сирти кумуш ёки алюминий билан қопланган яримшаффоф пластинкадан ташкил топган оптик қурилмадир (3-расм).



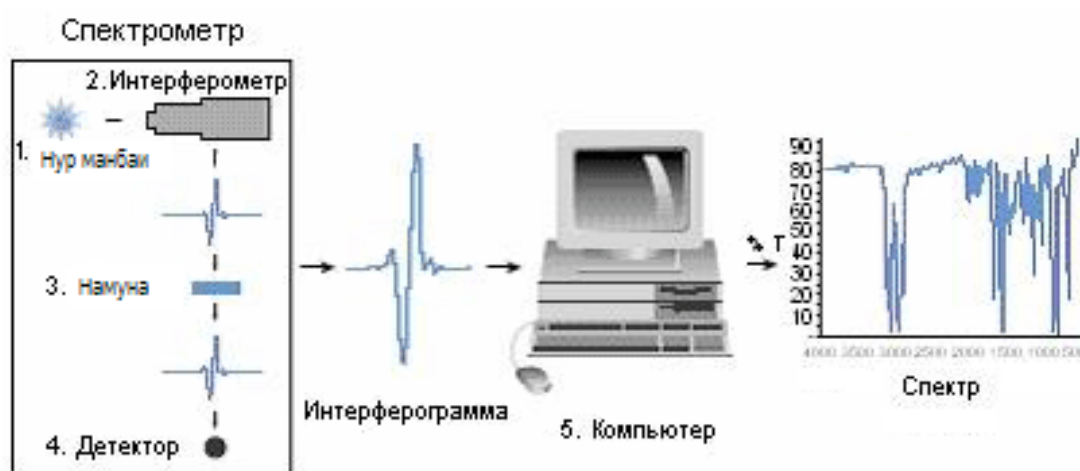
2-Расм. ИҚ-спектрометрларнинг таркибий қисмлари: (I) 1-нур манбаи, 2-нурни йиғувчи линза ёки кўзгу, 3-нур кирадиган тиркиш; (II) 4 ва 5 кўзгулар (линзалар), 6-учбурчакли призма ёки дифракцион панжара; (III) 8 намуна қўйиладиган қисм, 9- қабул қилувчи ва қайд қилувчи ускуналар қисми.



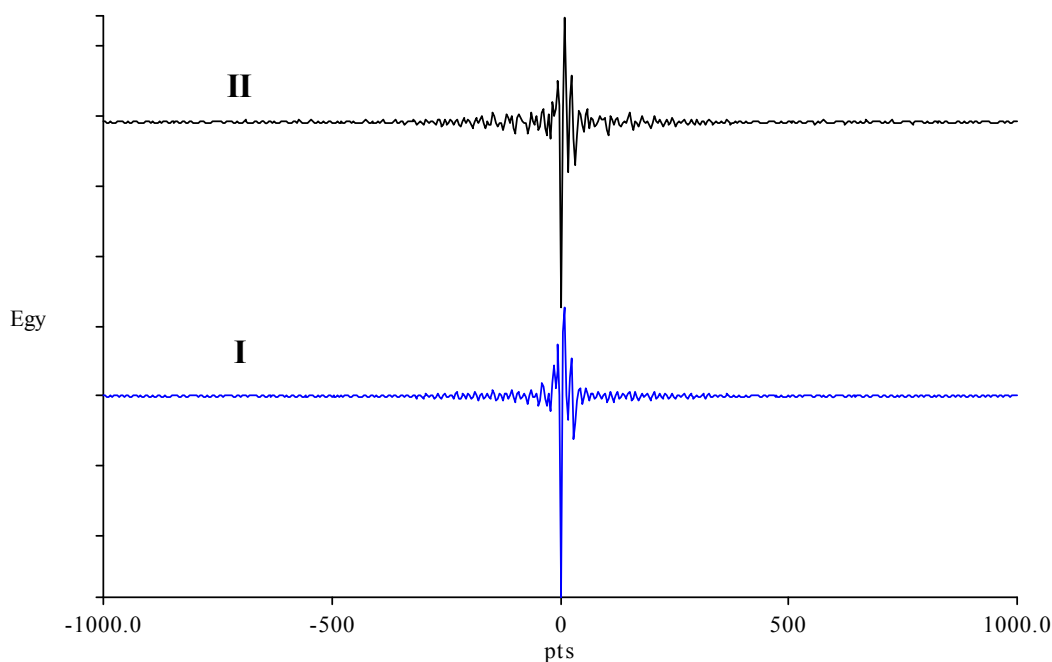
3-Расм. Майкелсон интерферометрининг тузилиши: 1-ҳаракатчан кўзгунинг (3) силжиш чегаралари, 2-ҳаракатланмайдиган кўзгу, 4-детектор, 5-нурни икки қисмга ажратувчи ярим кумушсимон кўзгу ва 6-нур манбаи.

Манбадан чиққан нур ёғдуси 6, яримшаффоф 5 пластинкага тушади. Пластинка ўзига тушаётган инфрақизил ёруғликни, интенсивлиги бўйича тақрибан ярмини 3 кўзгуга ўткази, ярмини эса 2 кўзгуга қайтаради. Ҳаракатланмайдиган ва ҳаракатчан кўзгулардан қайтган иккита нур қўшилган нуқтада интерференция ҳодисаси натижасида интенсивликнинг ўзгариши кузатилади. Бундай спектрни олиш қуйидагича амалга оширилади. Ҳаракатланувчи 3 кўзгу қандайдир вақт мобайнида (масалан, 1 с.) 1 сантиметрга яқин масофага раво силжийди, бу вақт орасида детекторда ҳосил бўлаётган сигнал (интерферограмма) қайд қилинади. Намунанинг

тўлиқ спектри, скан қилиш вақтида, яъни бир секунд мобайнида компьютерга ёзиб олинган интерферограмманинг ичида бўлади. Асбобга ўрнатилган ҳисоблаш машинаси Фурье-алмаштириш амалини бажаргандан сўнг бундай интерферограммадан нормал ютилиш спектри олинади. Фурье алмаштириш вақт бўйича ёйилган спектрни (5-расм) частота бўйича ёйилган спектрга (6-расм) айлантиради. Шундай қилиб, баён қилинган жараён бир неча секунд вақт олади холос, бунинг устига детектор спектрнинг ҳамма частоталари ($400-4000\text{ см}^{-1}$) тўғрисида бир вақтда маълумот беради, компьютер эса уни одатдаги спектр кўринишига айлантиради. Айнан шунинг учун Фурье спектроскопия спектрал маълумотлар олиш жараёнини 10-1000 баробар тезлаштиради. Фурье спектроскопиянинг асосий устунлиги унинг тезкорлигидир.

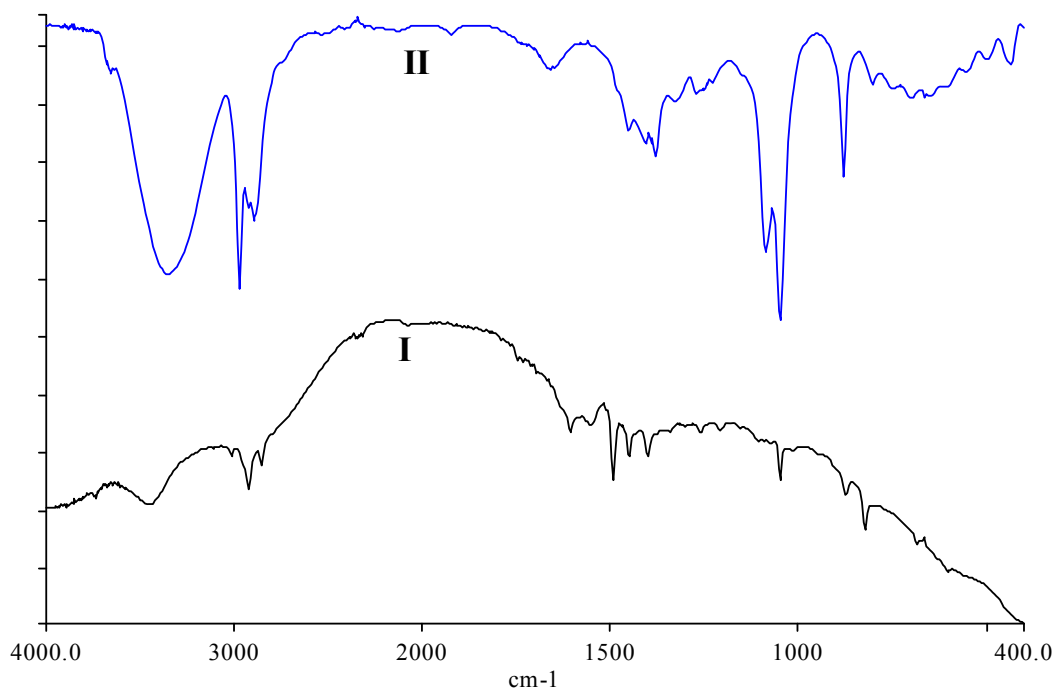


4-Расм. Фурье-ИҚ-спектрометри ишлаш тартибининг умумий кўриниши.



5-Расм. Стандарт (I) ва намунанинг (II) интерферограммалари.

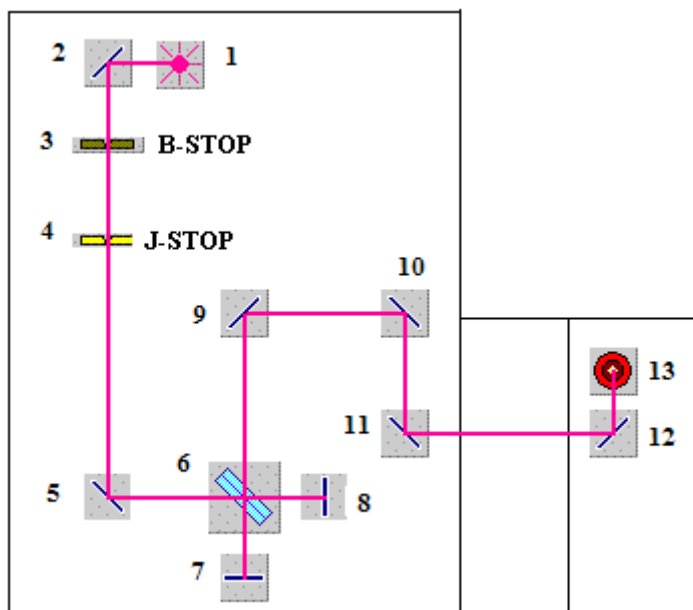
Стандарт (I) ва намунанинг (II) интерферограммалари бир-бирига жуда ўхшаш. Лекин, Фурье усулида математик ишлов берилганидан кейин спектрларнинг бир-биридан кескин фарқ қилишини кузатиш мумкин.



6-Расм. Стандарт (I) ва намунанинг (II) ИҚ-спектрлари.

Замонавий ИҚ-Фурье спектрометрлар дисперсион (монохроматорли) усулда ишловчи асбобларга қараганда бир қатор афзалликларга эга, масалан, юқори аниқлиги (тўлқин сонини аниқлашдаги хато $\pm 0.15 - 0.2 \text{ см}^{-1}$ дан ошмайди), жуда тезкорлиги ҳамда жуда кам микдордаги намуналардан ҳам (намунани кўп марта скан қилиб, фурье усулида) яроқли спектр ҳосил қила олиши ва олинган спектрлар устида амаллар (спектрларни бир-бирига таққослаш ва б.) бажариш мумкинлиги билан юқори устунликка эга.

Қуйида Perkin-Elmer фирмасининг System-2000 Фурье-ИҚ-спектрометрининг оптик схемаси келтирилган (7-расм): 1-нур манбаи (вольфрам галогенидли спираль); 2,5,7-12 кўзгулар; 3 - **B-STOP** (baffle stop) интерферометрга ўтадиган нур оқимининг кенглигини (ўлчамини) белгиловчи диафрагма; 4 – циркуляр **J-STOP** интерферометрга ўтадиган нурнинг бурчагини белгиловчи қисм; 6- нурни бўлувчи ярим кумушсимон кўзгу; 13-детектор (6-8 – Майкельсон интерферометри).



7-Расм. Перкин-Элмер (Perkin-Elmer) фирмасига тегишли System 2000 ИК-фурье спектрометрнинг оптик схемаси.

Юқорида таъкидлаб ўтганимиздек, фурье-ИҚ-спектрометрларга лазер (He-Ne) қурилмаси ўрнатилган. Лазер қурилмасидан чиққан тўлқин узунлиги $\lambda=632.99$ нм бўлган лазер нури ҳам интерферометрдан ўтади. Ундан, спектрометрни тўлқин узунлиги бўйича даражалашда, ҳаракатчан кўзгуни ҳаракатланмайдиган кўзгуга нисбатан доимо параллел ҳолатда туришини назорат қилишда ва спектрометр томонидан маълумотлар йиғиш жараёнида фойдаланилади. Демак, лазер қурилмаси ички стандарт вазифасини ўтайди, яъни спектрометр автоматик равишда ўзини-ўзи тўлқин узунлиги бўйича даражалаб туради. Олдинги спектрофотометрлардагидек, қўл билан даражалашнинг ҳожати йўқ.

Спектрофотометрларнинг ишлаш принципи намунадан ўтаётган нур интенсивлиги билан шу нурнинг частотаси орасидаги боғланишни ўлчашга асосланган. Ютилиш спектроскопиясида интенсивлик икки хил катталиқ яъни, оптик зичлик ва ўтказиш коэффициенти билан ифодаланиши мумкин. Оптик зичлик A намунага тушаётган нур интенсивлигини (I_0) ундан ўтган нур интенсивлигига (I) нисбатининг логарифмига тенг бўлган бирликсиз катталиқ. Ўтказиш коэффициенти эса I/I_0 га тенг бўлиб фоизларда ўлчанади.

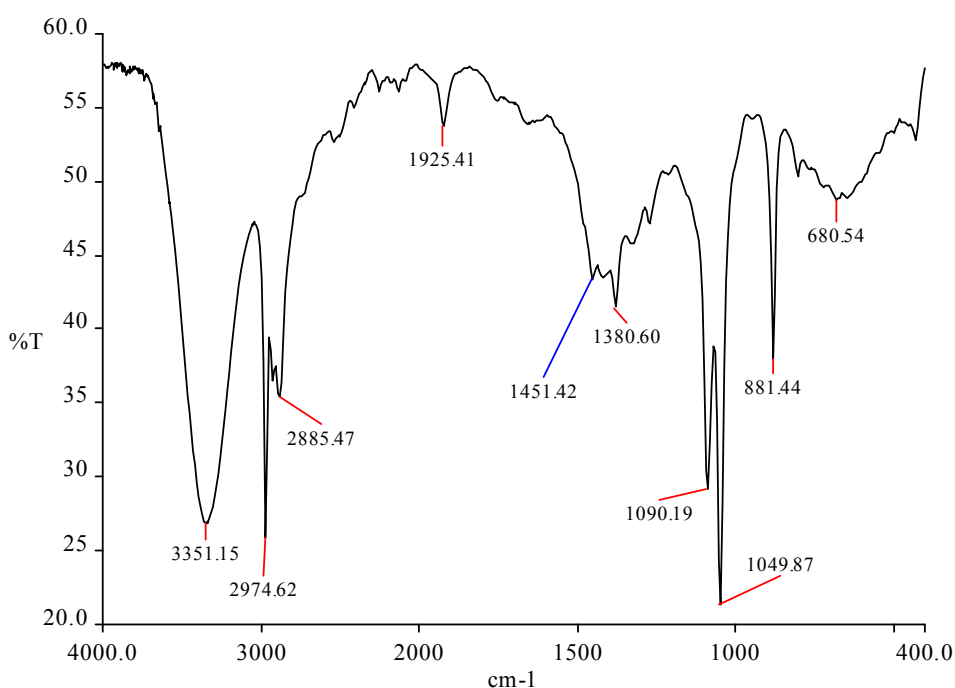
$$A = \lg(I_0/I); \quad T(\%) = (I/I_0) \cdot 100$$

A -оптик зичлик, T - ўтказиш коэффициенти, I_0 -намунага тушаётган нур интенсивлиги, I -намунадан ўтган нур интенсивлиги.

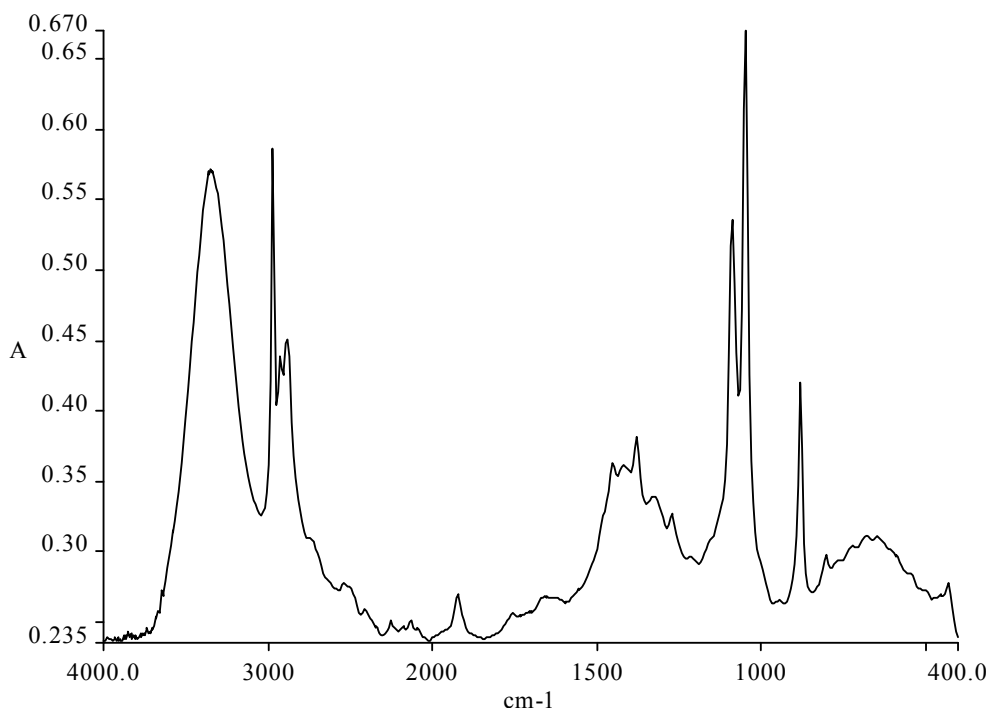
Маълумки атомларнинг спектрлари ингичка чизиқлардан, молекулаларники эса кенг полсалардан (йўлаклардан) иборат бўлади.

Одатда намунанинг ИҚ-спектри график шаклда такдим этилади. Графикнинг ордината ўқиға ўтказиш коэффициентини ($T(\%)$), абцисса ўқиға эса намунага тушаётган ИҚ нурлар частотасининг (тўлқин сони ν , cm^{-1}) қийматлари қўйилади. Шу иккала катталиқ орасидаги боғланишни ифодаловчи эгриликка намунанинг ИҚ ютилиш спектри дейилади (8-расм). Масалан 8-расмда келтирилган ИҚ спектр юқори частотали қисмида жойлашган кенг ютилиш полосасининг ўрни 3351.15 cm^{-1} , ўтказиш коэффициентини эса 27% ташкил этади. Демак намуна ўзига тушаётган частотаси 3351.15 cm^{-1} бўлган ИҚ нурнинг 27% ни ўтказиб, қолган 73% ни ютаяпти ва бунинг натижасида айнан шу ютилиш полосаси ҳосил бўлаяпти.

Одатда, ИҚ-спектрлар 8-расмдагидек кўринишда, яъни ордината ўқида ўтказиш кўрсаткичи ($T, \%$) фоизларда ифодаланган ҳолатда келтирилади. Замонавий ИҚ-спектрометр программалари спектрларни ўтказиш кўрсаткичидан ($T, \%$) ютилиш кўрсаткичига (Absorbance), яъни ордината ўқида ютилиш кўрсаткичи 1-нинг улушларида келтирилган ҳолатга бемалол ўгиради (9-расм).



8-Расм. Номаълум органик модданинг ИҚ-спектри.



9-Расм. Номаълум органик модданинг ИҚ-спектри.

ИҚ-спектр молекуланинг тебраниш сатҳлари орасидаги ўтишлар туфайли юзага келади ва гуруҳларнинг характеристик частоталари хақида маълумот беради. Гуруҳларнинг характеристик частоталари тўлқин сонининг қайси қисмида жойлашиши Гук қонуни асосида тушунтирилади. Унга кўра **A** ва **B** атомлар орасидаги кимёвий боғ эластик пружинадек тасаввур қилинади ($A \sim B$) ва тебраниш частоталарининг қиймати (ν , cm^{-1}), боғнинг табиатига ҳамда **A** ва **B** атомларнинг массаларига боғлиқ равишда қуйидаги формула орқали тақрибий ҳисобланади:

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{k/m},$$

бу ерда, ν -тебраниш частотаси, cm^{-1} ;

π -ўзгармас катталиқ;

c -ёруғлик тезлиги;

k -хар бир боғ учун характерли бўлган боғ доимийси;

m -келтирилган масса.

Келтирилган масса қуйидаги формула бўйича ҳисобланади:

$$m = \frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B}$$

Бундан кўриниб турибдики, **A** ва **B** атомлар массаларининг ортиши тебраниш частотасининг қийматини камайтиради яъни, спектрдаги шу тебранишга

тегишли ютилиш полосасининг максимумини қуйи частотали томонга қараб силжитади. Масалан, бунга N-H ($\nu \approx 3200 \text{ см}^{-1}$) гуруҳидан P-H ($\nu \approx 2400 \text{ см}^{-1}$) гуруҳига ҳамда O-H ($\nu \approx 3300 \text{ см}^{-1}$) боғидан S-H ($\nu \approx 2600 \text{ см}^{-1}$) боғига ўтгандаги юзага келадиган частота катталикларининг ўзгаришини мисол қилиш мумкин. **A-B**, **A=B**, **A≡B** боғларни ҳосил қилган атомларнинг келтирилган массаси бир хил, фақат *k*-доимийликлари бир – биридан фарқ қилганлиги туфайли ν нинг қийматлари ҳам хар хил бўлади. Масалан, формамаидда ($\text{H}_2\text{N-CHO}$) N-C боғнинг *k*-доимийси $12.8 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$, N-метилметиленаминда ($\text{H}_3\text{C-N=CH}_2$) N=C боғнинг *k*-доимийси $16.0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$ ва ацетонитрилда эса ($\text{H}_3\text{C-C}\equiv\text{N}$) C≡N боғнинг *k*-доимийси $27.7 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$ га тенг. Шундан келиб чиққан ҳолда $\nu(\text{N-C}) \approx 1100 \text{ см}^{-1}$, $\nu(\text{N=C}) \approx 1600 \text{ см}^{-1}$ ва $\nu(\text{N}\equiv\text{C}) \approx 2250 \text{ см}^{-1}$ га тенг.

Яна шуни такидлаб ўтиш керакки, боғнинг диполь моменти (μ) нолга тенг бўлган **A-A**, **A=A** ва **A≡A** каби гуруҳлар ИҚ-спектрда ютилиш полосалари ҳосил қилмайди (ёки шу тебранишларга тегишли ютилиш полосаларининг интенсивлиги жуда паст бўлади), бу типдаги гуруҳлар атомлардан биттасига биронта электроноакцептор атом ёки гуруҳ киритилгандан кейин боғнинг диполь моменти нолдан фарқ қилиши туфайли ютилиш полосасини ҳосил қилиши мумкин.

Тебраниш турлари ва гуруҳларнинг характеристик частоталарининг қийматлари

Умумий ҳолда молекулада қуйидаги ҳаракатлар бўлиши мумкин: 1. молекуладаги электронларнинг ҳаракати; 2. молекулани ташкил этган атом ядроларининг тебранма ҳаракати; 3. молекуланинг масса маркази атрофида айланиши; 4. атом ядроси ва электронларининг ўз ўқи атрофида айланиши; 5. молекуланинг илгариланма ҳаракати.

Молекуланинг тўлиқ энергияси айнан шу ҳаракатларнинг, яъни электрон, тебраниш, айланиш ҳаракатлари энергияларининг йиғиндисидан иборат бўлади:

$$E_{\text{тўлиқ}} = E_{\text{элек}} + E_{\text{тебр}} + E_{\text{айл}} + E_{\text{илл}}$$

ИҚ-спектроскопия усулида фақат 2-чи ва 3-чи ҳолатлардаги ҳаракатлар қаралади.

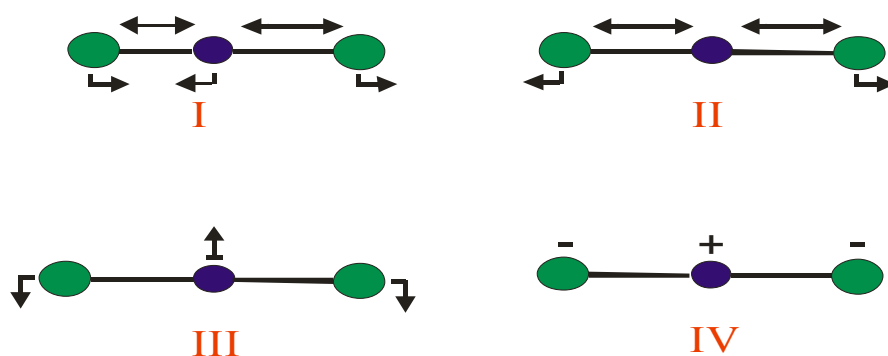
Молекулаларнинг илгариланма ҳаракати молекуляр спектрларга таъсир қилмайди. ИҚ-спектрометрда ишлатиладиган инфрақизил нурларнинг энергияси молекуланинг тебраниш энергияси катори бўлади. Шунинг учун ҳам у молекуланинг электрон энергетик сатҳлари орасидаги электрон ўтишларга таъсир қила олмайди, чунки - $E_{\text{тебр}} \ll E_{\text{эл}}$. $E_{\text{эл}}$ – электрон спектроскопия усулида қаралади. Лекин, тебраниш ҳаракатининг энергияси айланма ҳаракатлар энергиясидан анча катта бўлганлиги туфайли ($E_{\text{айл}} \ll E_{\text{тебр}}$) ИҚ-спектрларда тебранма сатҳлар орасида ўтишлар бўлганда, айланма сатҳлар орасида ҳам ўтишлар кузатилади. Шунинг учун айрим адабиётларда

ИҚ-спектроскопия усули тебранма-айланма спектроскопия усули деб ҳам юритилади.

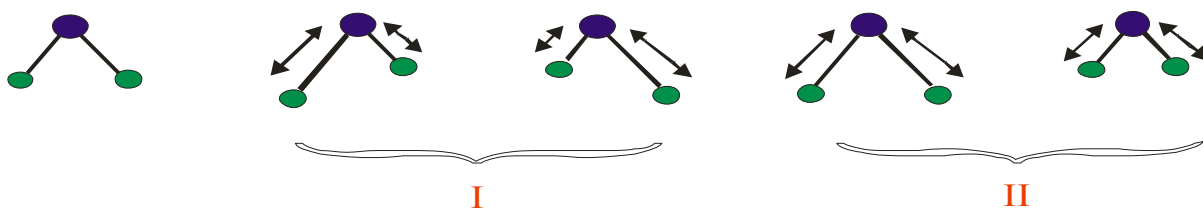
Атомлар сони N бўлган молекулани қараймиз. Ҳар бир атомнинг ўрнини унинг учта координатасини аниқлаш орқали топиш мумкин (масалан, тўғри бурчакли координата системасида x , y ва z координаталари). Координата қийматларининг тўлиқ сони $3N$ бўлади ва шунингдек, унинг ҳар бир координатаси бошқаларига боғлиқ бўлмаган ҳолда берилгани учун молекула $3N$ эркинлик даражасига эга деб айтиш мумкин. Молекуланинг ҳамма $3N$ координатасини аниқлаш уни тўлиқ аниқлаш яъни, кимёвий боғларнинг узунлигини, улар орасидаги бурчакларни, эгаллаган жойларининг ўрнини топиш имкониятини беради.

Молекуланинг илгариланма ҳаракати $3N$ эркинлик даражасининг учтаси билан характерланади ва бу қолган $3N - 3$ даражасига тегмайди. Айланишни баён қилиш ҳам учта эркинлик даражасини талаб қилади ва шундан сўнг молекулада $3N - 6$ эркинлик даражаси қолади. Молекула ҳаракатининг яна бир охириги шакли унинг ички тебранишларидир. Чизиқли бўлмаган N атомдан ташкил топган молекула $3N - 6$ та ҳар хил ички тебранишга эга бўлади.

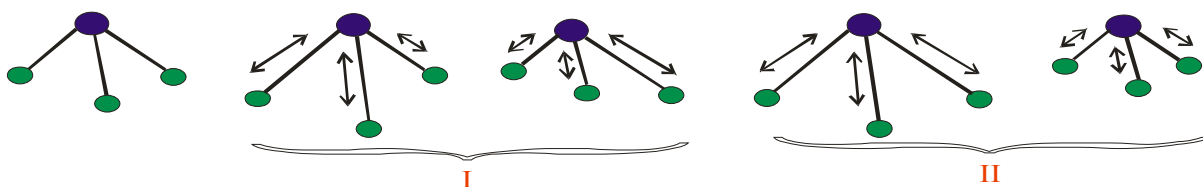
Чизиқли, $O=C=O$ ва $S=C=S$ каби молекулалар $3N-5$ тебранишга эга. Демак, карбонат ангидрид $3 \times 3 - 5 = 4$ та тебранишга эга: **I**-асимметрик валент (2350 см^{-1}), **II**-симметрик валент (1340 см^{-1}), **III**- ва **IV**- деформацион тебраниш (666 см^{-1}). **III**- ва **IV**-икки хил текисликда юз берадиган бир хил тебранишдир. Масалан, **III** тебраниш ху текислигида кузатилса **IV**, хз текислигида кузатилади.



Уч ва ундан ортиқ атомлардан ташкил топган функционал гуруҳлардаги тебранишлар валент бурчакнинг ўзгариши ва ўзгармаслигига қараб мос равишда валент ва деформацион тебранишларга бўлинади. Валент бурчакнинг ўзгариши билан борадиган тебранишлар деформацион тебранишлар дейилади. Кимёвий боғ бўйлаб бўладиган валент тебранишларида эса фақат кимёвий боғнинг чўзилиши ва қисқариши кузатилади. Валент тебранишларда боғлар орасидаги бурчак ўзгармайди.



10-Расм. Метилен гуруҳининг асимметрик (I, 2926 см^{-1}) ва симметрик (II, 2853 см^{-1}) тебранишлари.



11-Расм. Метил гуруҳининг асимметрик (I, 2926 см^{-1}) ва симметрик (II, 2853 см^{-1}) тебранишлари.

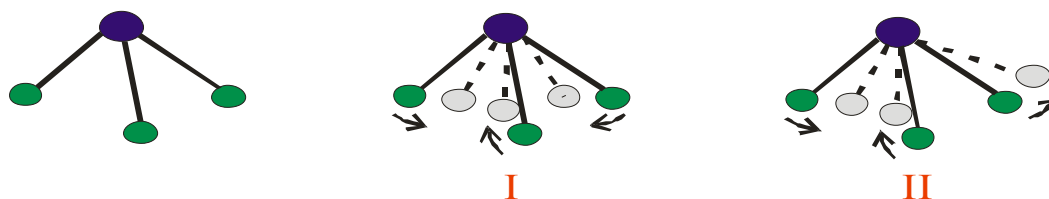
Асимметрик валент тебранишлар (v^{as}) симметрик валент тебранишларга (v^s) нисбатан ИҚ спектрнинг юқори частотали қисмида ютилиш полосаларини беради.

Деформацион тебранишга– қайчисимон (δ), урчуксимон айланма (ω), айланма ва маятниксимон (ρ) тебранишлар киради.



12-Расм. Метилен гуруҳининг деформацион тебранишлари: I-қайчисимон (1467 см^{-1}), II-урчуксимон айланма ($\sim 1300 \text{ см}^{-1}$), III-айланма ($\sim 1300 \text{ см}^{-1}$) ва IV-маятниксимон (790-720 см^{-1}).

Уч атомли гуруҳлардан фарқли ўлароқ, тўрт атомдан ташкил топган гуруҳларда симметрик (δ^s) ва асимметрик (δ^{as}) деформацион тебранишлар фарқланади.



13-Расм. Метил гуруҳининг симметрик (I-1380 см^{-1}) ва асимметрик (II-1460 см^{-1}) деформацион тебранишлари.

Бутун ИҚ-спектрни шартли равишда якка боғ (3500-2800 см^{-1}), уч боғ (2300-2100 см^{-1}), қўш боғ (1800-1540 см^{-1}) ва “бармоқ излари” (1100-400 см^{-1}) соҳаларига бўлиш мумкин. “Бармоқ излари” дейилишига сабаб спектрларнинг бу қисми ҳар бир модда учун ўзига хосдир. ИҚ-спектрларда

кузатиладиган функционал гуруҳларнинг характеристик тебраниш частоталари 1-жадвалда келтирилган.

1-Жадвал. Функционал гуруҳларнинг характеристик тебраниш частоталари

<i>Ютилиш соҳаси см⁻¹</i>	<i>Гуруҳ</i>	<i>Тебраниш тури</i>	<i>Интенсивлиги</i>
3650-3500	О-Н (Н боғ ҳосил қилмаган)	<i>валент</i>	<i>жуда юқори</i>
3500-3100	N-H	<i>валент</i>	<i>юқори</i>
3500-3000	О-Н (Н боғ ҳосил қилган)	<i>валент</i>	<i>кенг ва интенсив</i>
3300-3200	≡C-H	<i>валент</i>	<i>паст</i>
3100-3000	(Ar) =C-H	<i>валент</i>	<i>паст</i>
3090-3010	=C-H	<i>валент</i>	<i>ўртача</i>
2962	CH ₃	<i>асимм. валент</i>	<i>юқори</i>
2926	CH ₂	<i>асимм. валент</i>	<i>юқори</i>
2890	>CH	<i>валент</i>	<i>паст</i>
2872	CH ₃	<i>симм. валент</i>	<i>юқори</i>
2853	CH ₂	<i>симм. валент</i>	<i>юқори</i>
2800-2000	NH ⁺ , NH ₂ ⁺ , NH ₃ ⁺	<i>валент</i>	<i>ўртача</i>
2775-2700	-C(=O)-H	<i>валент</i>	<i>паст</i>
2700-2560	-(PO)OH	<i>валент</i>	<i>паст</i>
2650-2550	(Alkyl)-S-H	<i>валент</i>	<i>паст</i>
2650-2400	-O-D	<i>валент</i>	-
2440-2350	-P-H	<i>валент</i>	-
2270	N=C=O	<i>валент</i>	-
2300-2200	-C≡N	<i>валент</i>	<i>ўртача</i>
2260-2190	-C≡C-	<i>валент</i>	-
2200	Si-H	<i>валент</i>	<i>юқори</i>
2000-1800	Me _n (CO) _m (Me-Fe, Cr ва б.)	<i>валент</i>	<i>уч-тўртта интенсив соҳа</i>
1980	-C=C=C-	<i>асимм. Валент</i>	<i>юқори</i>
1835-1820	=C-H	<i>деф.т. обертони</i>	<i>паст</i>
1820-1650	>C=O	<i>валент</i>	<i>жуда интенсив</i>
1680-1650	-N=O	<i>валент</i>	
1680-1640	-C=C-	<i>валент</i>	<i>паст</i>
1650-1600	-C=N-	<i>валент</i>	<i>интенсив</i>
1640-1620	Alk-O-NO ₂	<i>асимм. Валент</i>	<i>интенсив</i>
1640-1560	-NH ₂	<i>қайчисимон т.</i>	<i>Ўртача</i>
1640-1535	-NH ₃ ⁺	<i>асимм. Деформ.</i>	<i>ўртача</i>
1625-1610	-O-N=O	<i>валент</i>	
1610-1590	Ar (C ₆ H ₆ ва б.)	<i>халқа т.</i>	<i>ўртача</i>
1577	-N=N-	<i>валент</i>	<i>паст</i>

I-жадвал давоми

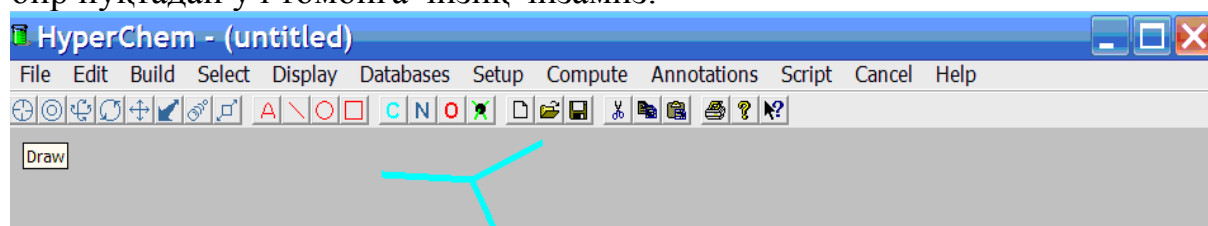
1570-1520	-N-NO ₂		
1560-1470	-C-N=O	асимм. Валент	
1560	-C-NO ₂	асимм. Валент	
1520-1490	-NH ₃ ⁺	симм. деформ.	
1520	Ar-NO ₂		
1500-1480	Ar (C ₆ H ₆ ва б.)	халқа т.	ўртача
1470-1420	-CH ₃	асимм. деформ.	
1465-1400	-CH ₂	асимм. деформ.	
1420-1410	=C-H	деформ.	
1410-1350	-N-N=O	симм. валент	интенсив
1400-1350	-CH ₃	симм. деформ.	
1400	-SO ₂	асимм. валент	
1380-1350	(нитрат иони) NO ₃ ⁻		интенсив
1350-1000	-C-N-	валент	
1350-1150	>CH ₂	урчуқсимон т.	
1340-1310	-N-NO ₂	симм. валент	
1335-1310	-SO ₂	асимм. валент	
1320	(нитрит иони) NO ₂ ⁻		
1300-1250	-P=O	валент	
1300-1000	C-F	валент	
1285-1260	Alk-O-NO ₂	симм. валент	
1280-1270	-N-NO ₂	симм. валент	интенсив
1280-1100	-C-O-C-	асимм. валент	интенсив
1265-1258	-Si-CH ₃		интенсив
1250-1175	-P=O	валент	интенсив
1240-1190	-P-O-C-	валент	
1205-1085	-C-OH	валент	интенсив
1190-1150	-P-O-	валент	
1100-1000	Si-O-	валент	
1100-1050	ClO ₄ ⁻		
1075-1020	-C-O-C-	симм. Валент	интенсив
1050-1030	-P-O-C-	валент	интенсив
1025-1010	циклопропан халқа тебраниши		
1000-950	циклобутан халқа тебраниши		
980-930	ClO ₃ ⁻		
890	=CH ₂	деформ. т.	
880	-C-NO ₂	валент	интенсив
880-870	-O-O-	валент	паст
870-800	(Ar) -C-H	деформ. т.	
840-815	(нитрат иони) NO ₃ ⁻		интенсив
830	-S-H	деформ. т.	
810-790	(бромат иони) BrO ₃ ⁻		

785-730	(йодат иони) JO_3^-		
780-710	$>\text{CCl}_2$, $-\text{CCl}_3$, CCl_4		
750	$-\text{P}=\text{S}$	валент	
750	(нитрит иони) NO_2^-		
750-650	$-\text{P}-\text{C}-$	валент	
750-650	$-\text{C}-\text{S}-\text{C}-$	валент	
720	$>\text{CH}_2$	маятн. т.	
705-685	$\text{H}_3\text{C}-\text{S}-$	валент	
700-600	$-\text{C}-\text{SH}$	валент	
680-600	$>\text{CBr}_2$, $-\text{CBr}_3$, CBr_4		
670	$(\text{C}_6\text{H}_6)-\text{C}-\text{H}$	деформ. т.	
650-600	$\text{C}-\text{Cl}$		
650-600	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	деформ. т.	
628-620	ClO_4^-		
610	$-\text{C}-\text{NO}_2$	деформ. т.	
600-570	$\text{Alk}_3\text{C}-\text{S}-$	валент	
660-610	$\text{C}-\text{Cl}$	валент	
595-510	$\text{C}-\text{Br}$	валент	
520-490	$\text{C}-\text{J}$	валент	
550-450	$\text{Alk}-\text{S}-\text{S}-\text{Alk}$	валент	паст
490-430	$\text{Ar}-\text{S}-\text{S}-\text{Ar}$	валент	

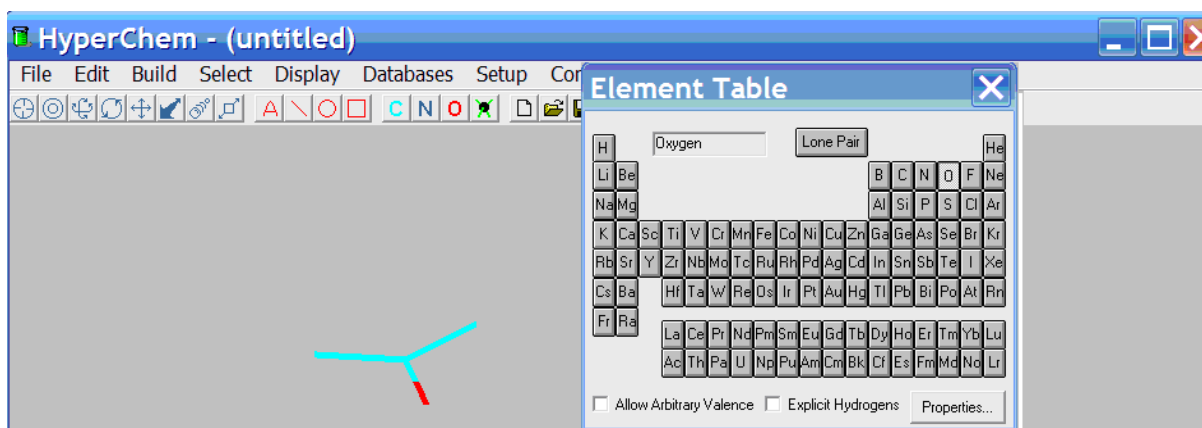
Тебранишларни квант-кимёвий усуллар ёрдамида анимацион ўрганиш

Тебраниш турларини мукамал ўрганиш ва анимацион ҳолатда кўриш учун квант-кимёвий ҳисоблашлардан фойдаланиш мақсадга мувофиқдир. HyperChem (Гиперкэм, www.hyper.com) - тебранишларни визуал кўрсатиб бера оладиган, энг қулай программалар мажмуаси ҳисобланади. Лекин, шуни такидлаб ўтиш керакки, экспериментал ва назарий ИҚ-спектрлар интенсивликлари фақат айрим DFT (Density Functional Theory- функционал зичлик назарияси) усуллари билан ҳисоблангандагина мос тушуши мумкин. Аммо, экспериментал ва назарий ИҚ-спектрлардаги тўлқин сони (ν , cm^{-1}) қийматлари ярим эмпирик, ноэмпирик (ab initio) ва функционал зичлик назарияси (DFT) усуллари билан ҳисоблаганда ҳам 200 cm^{-1} - гача фарқ қилиши мумкин. Шунинг учун ҳам ИҚ-ҳисоблашларда кўпайтирилувчи коэффициентлардан (weighting factors) фойдаланилади.

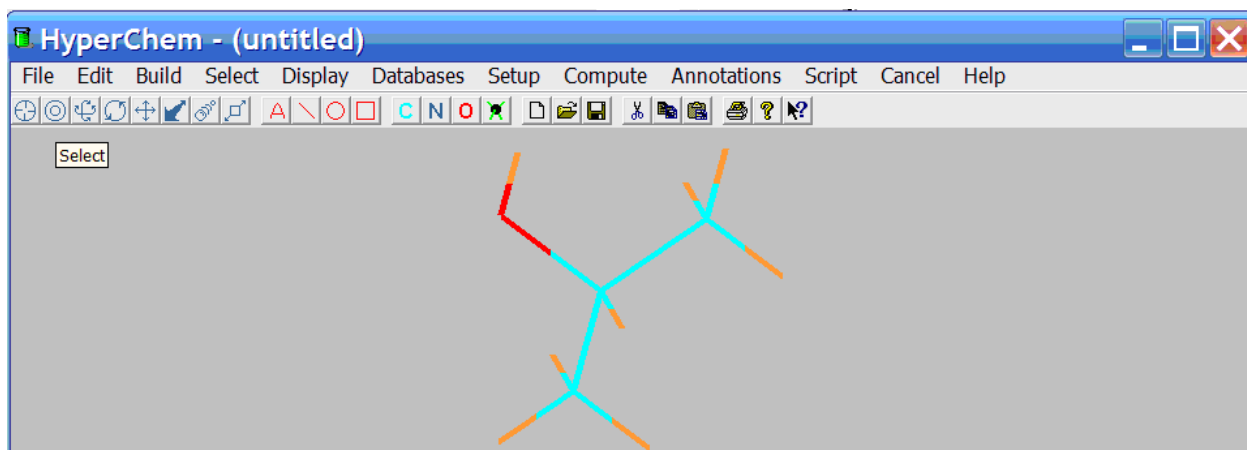
Инструментлар панелидан чизиш (Draw) тугмасини бир марта босиб, бир нуқтадан уч томонга чизиқ чизамиз:



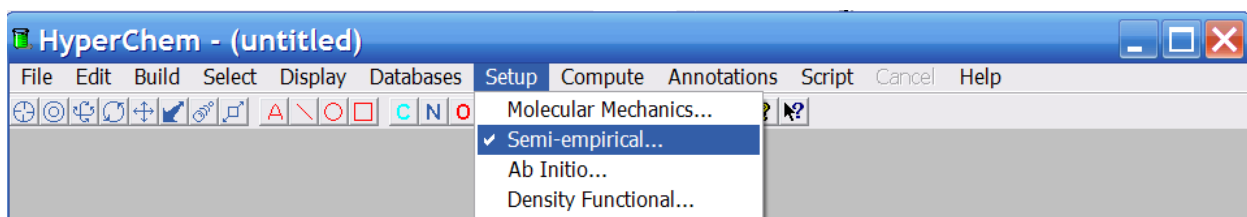
Чизиш (Draw) тугмасини икки марта босиб, элементлар жадвали очилади ва ундан кислород атоми белгилаб олинади. Бу амални инструментлар панелидаги кислород атомини (O) белгилаш орқали ҳам амалга оширса бўлади. Ундан кейин, курсорни чизилган чизиклардан бирининг учига босилади. Элементлар жадвolidан углерод атоми белгилаб олиниб, қолган иккита чизик учига ва чизиклар бирлашган нуқтага босилади.

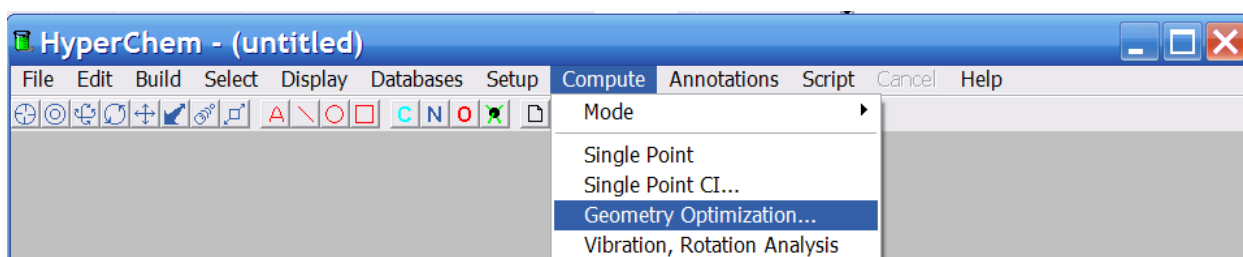
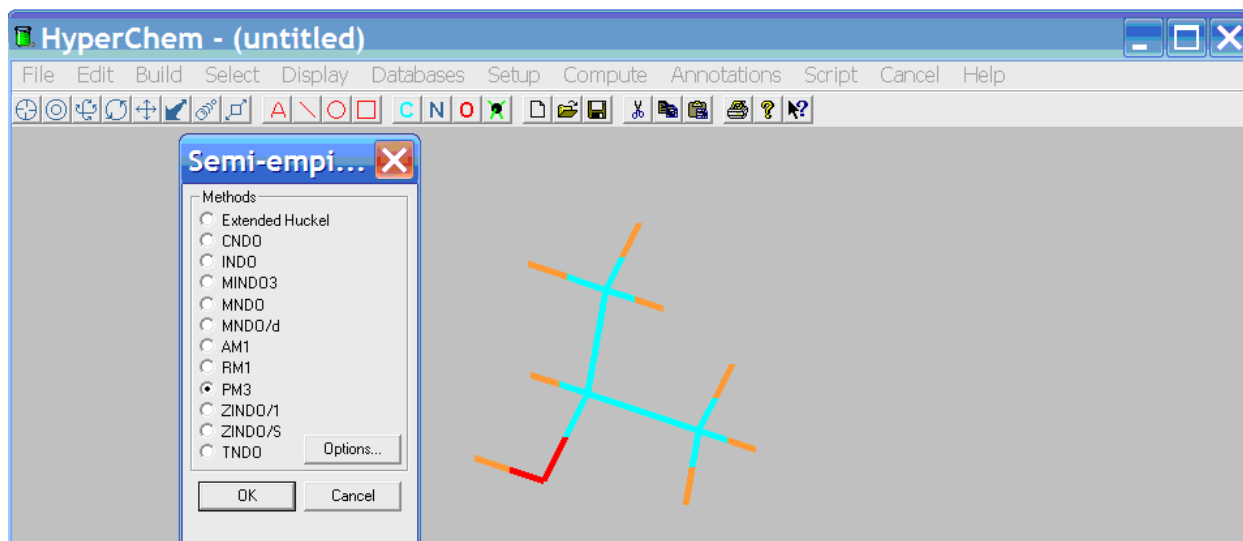


Шундан кейин, белгилаш (Select) тугмасини икки марта босилади, натижада керакли жойга водород атоми қўшилган, пропанол-2 структураси ҳосил бўлади:

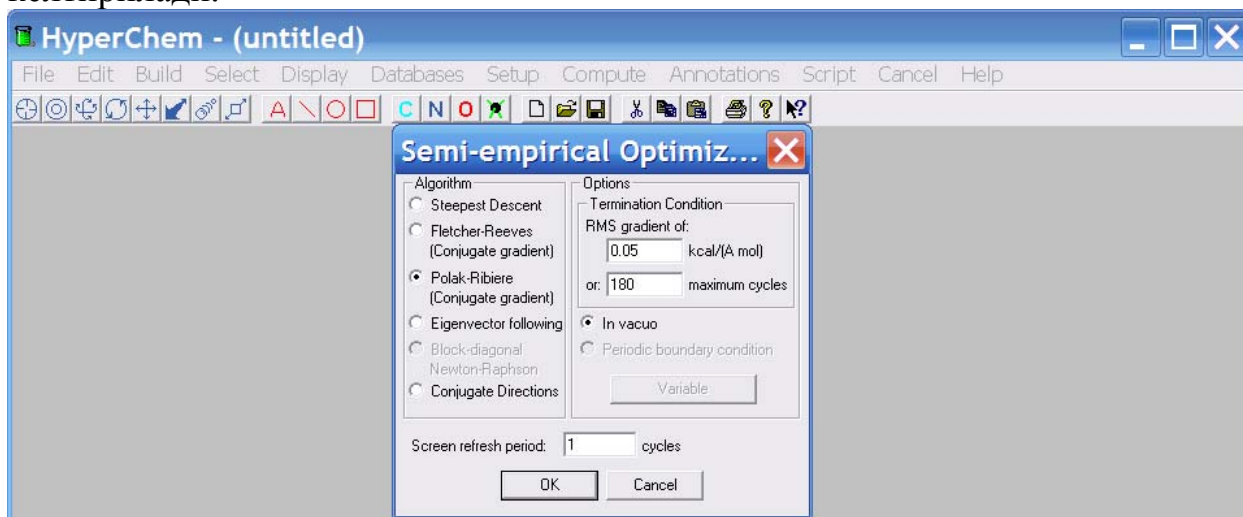


Чизилган геометрияни ярим эмпирик (semi-empirical) ҳисоблаш усули ёрдамида оптимизация қилиш учун менюлар сатридаги **Setup**–га кирилади ва RM3 методи белгилаб олиниб, ҳисоблаш (**Compute**) қисмидан Geometry Optimization ёзуви босилади.

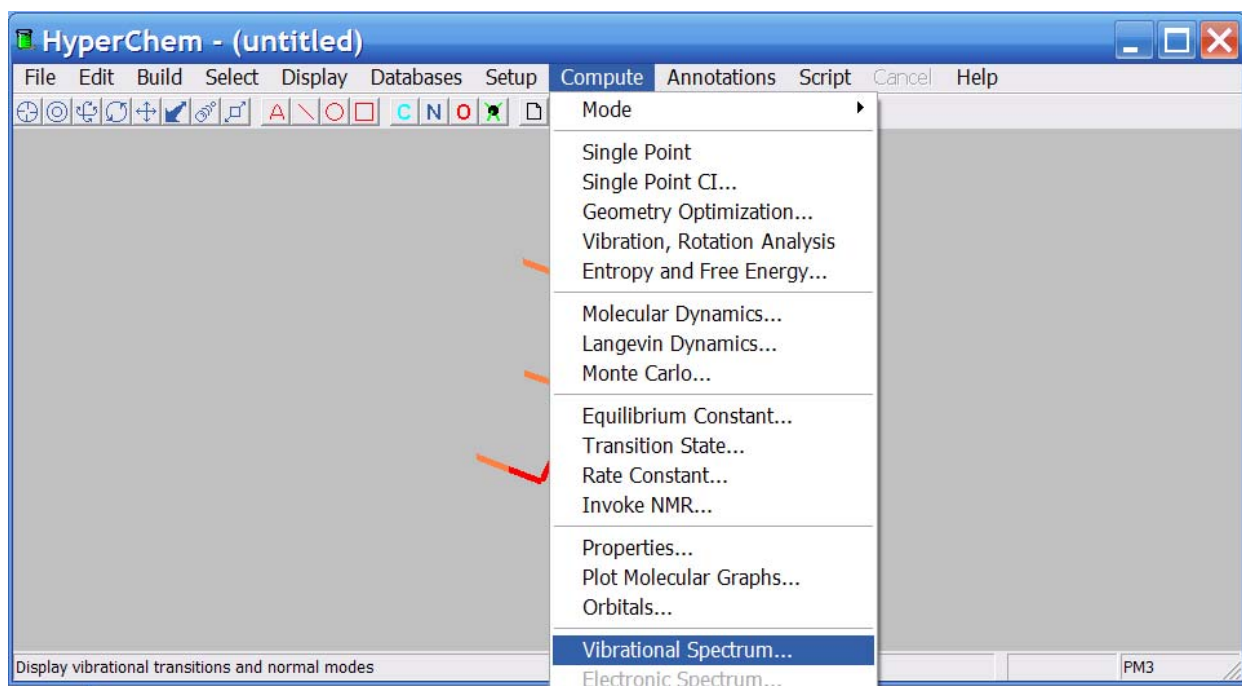




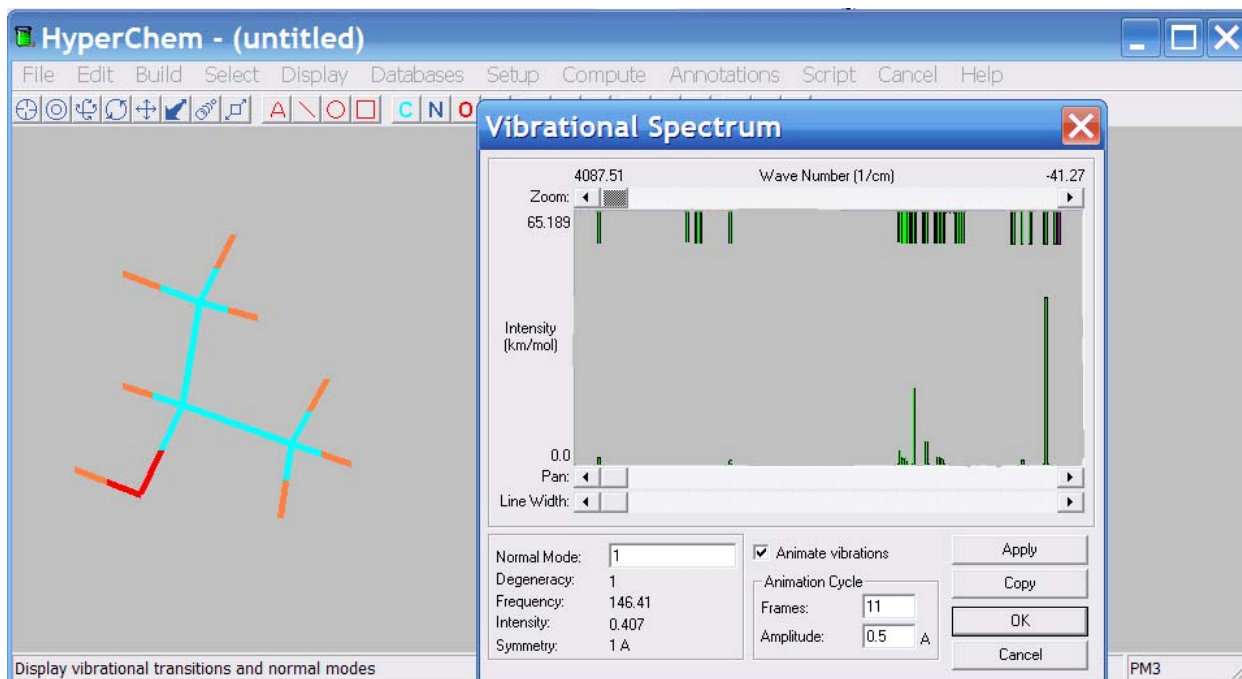
Муқобиллаш (оптимизация) алгоритми сифатида Polak-Ribiere алгоритми белгиланади. ОК тугмасини босиш билан оқ геометрия оптимал ҳолатга келтирилади.



Шундан кейин молекуланинг ИҚ-спектрини ҳисоблаш мумкин. Бунинг учун, ҳисоблаш (**Compute**) қисмидан **Vibration, Rotation analysis** ёзуви белгиланади. PM3 ярим эмпирик ҳисоблаш усули ёрдамида олинган тебранишлар спектрини ҳисоблаш (**Compute**) қисмидаги **Vibrational Spectrum** ёзувини белгилаш орқали қараб чиқишимиз мумкин.

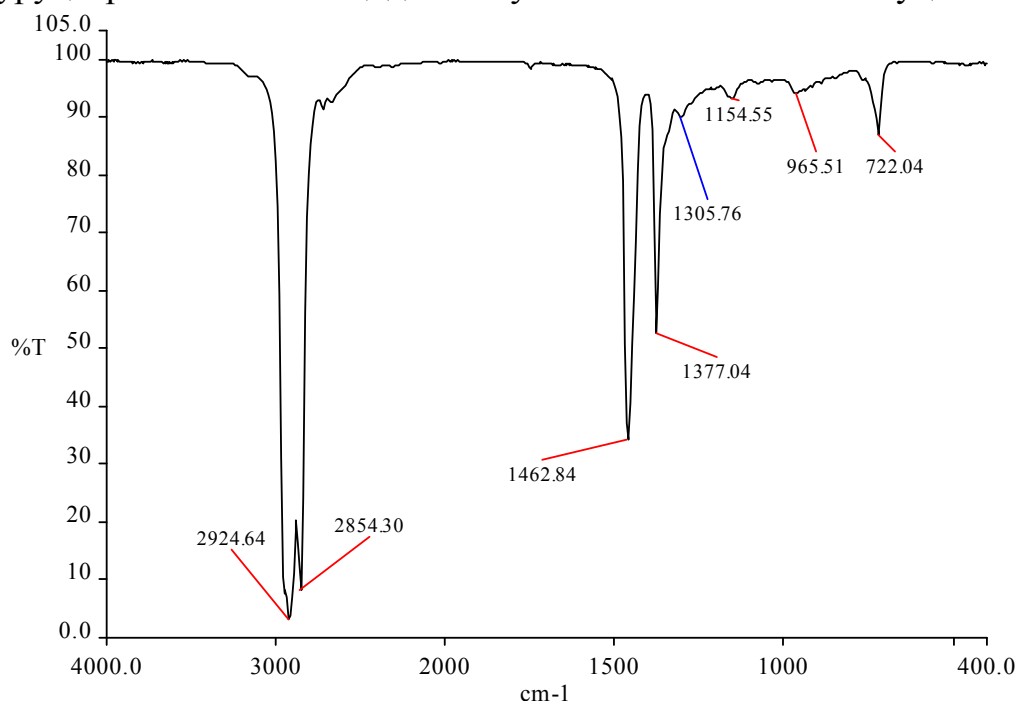


Vibrational Spectrum дарчиси юқори қисмида $4087 - 41 \text{ cm}^{-1}$ соҳадаги ҳисобланган тебраниш тўлқин сонлари келтирилган. Қуйи қисмида эса, уларнинг интенсивликлари келтирилган. Юқори қисмидан биронта тебраниш белгилаб олинади ва қўллаш (Apply) тугмаси босилади. Натижада, маълум бир гуруҳ тебраниши анимаия қилинади. Айни гуруҳ тебранишини кузатиш жараёнида, шу гуруҳнинг кўпроқ тебранишини ва шунинг натижасида молекуладаги бошқа гуруҳларнинг ҳам қисман тебранишини кузатиш мумкин. Айрим ҳолатларда, бундай механик тебранишлар (кинематик фактор) ҳам ютилиш соҳасининг кузатилишига олиб келиши мумкин.



Ютилиш полосаларининг частотаси, интенсивлиги ва шаклини ўрганиш асосида моддалар синфи ҳақида хулосалар қилиш

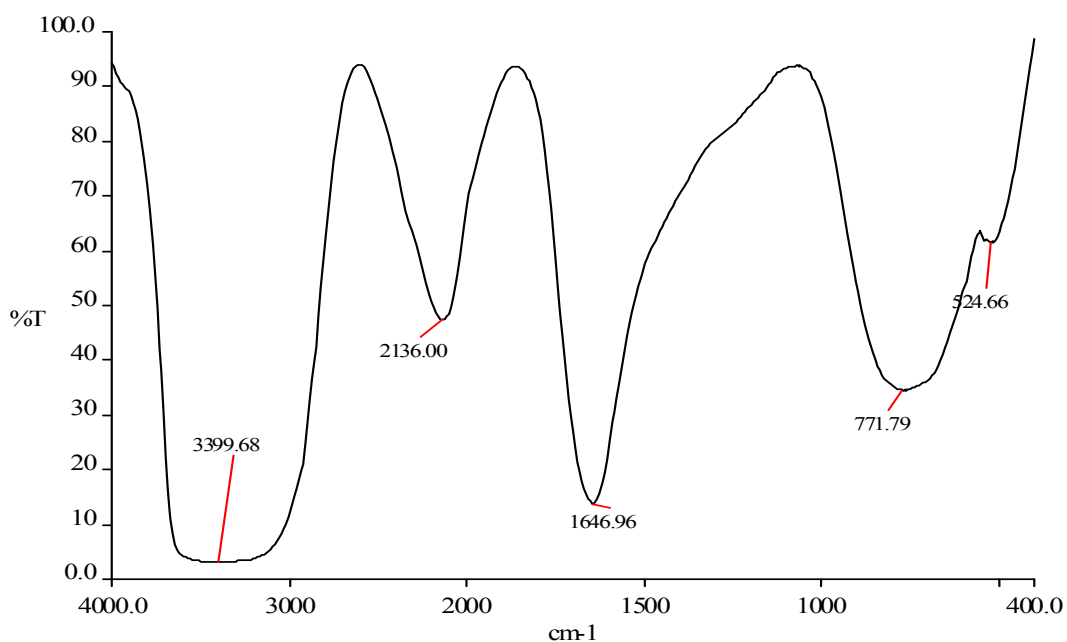
Айрим ҳолларда ИҚ-спектр полосаларининг ютилиш частоталарини билган ҳолда уларнинг қайси функционал гуруҳларга тегишли эканлигини топиб, модданинг синфи ҳақида хулосалар қилиш мумкин. Тўйинган ва тўйинмаган углеводородларнинг ИҚ-спектрида фақат С-Н боғнинг валент ва деформацион тебранишлари туфайли юзага келган ютилиш полосалари кузатилади (14-расм). Лекин, ИҚ-спектрдан углеводород занжиридаги метил, метилен гуруҳларининг сони ҳақида маълумот олиш имконияти йўқ.



14-Расм. Вазелиннинг ИҚ – спектри.

Спектрнинг 2850-2950 см⁻¹ ораликдаги соҳасида метил (-СН₃), метилен (-СН₂) гуруҳларининг асимметрик ва симметрик валент тебранишлари туфайли юзага келган полосалар жойлашади. Метил гуруҳининг асимметрик ва симметрик деформацион тебранишлари ҳамда метилен гуруҳининг қайчисимон тебранишлари натижасида юзага келган полосалар спектрнинг 1462 ва 1377 см⁻¹ – оралиғидаги соҳасига тўғри келади. Спектрнинг 1305 ва 722 см⁻¹ –соҳасдаги интенсивлиги кам бўлган полосалар метилен гуруҳининг айланма ҳамда маятниксимон тебранишлари туфайли юзага келади.

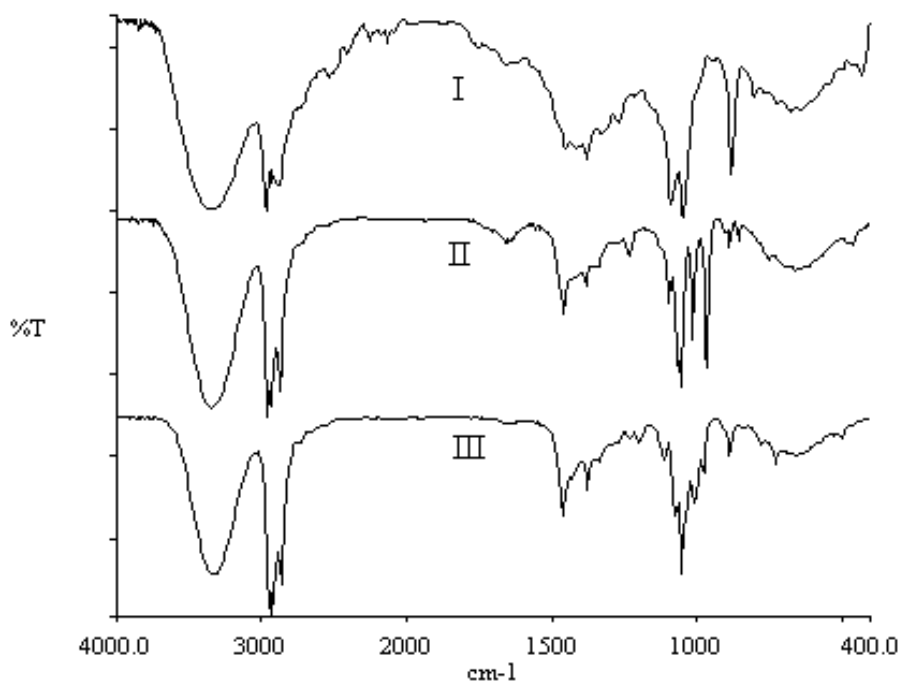
ИҚ-спектрнинг юқори частотали қисмида (3600-3100 см⁻¹) ютилиш полосаларининг бор-йўқлигига қараб, молекуланинг таркибида ОН ёки NH₂ (>NH) гуруҳларининг мавжуд бўлиши ё бўлмаслиги ҳақида хулоса қилинади. Айрим ҳолларда, намуна таркибидаги намлик ҳам мана шу ораликда интенсивлиги кам бўлган ютилиш полосасининг кузатилишига сабаб бўлиши мумкин (15-расм).



15-Расм. Сувнинг ИҚ-спектри.

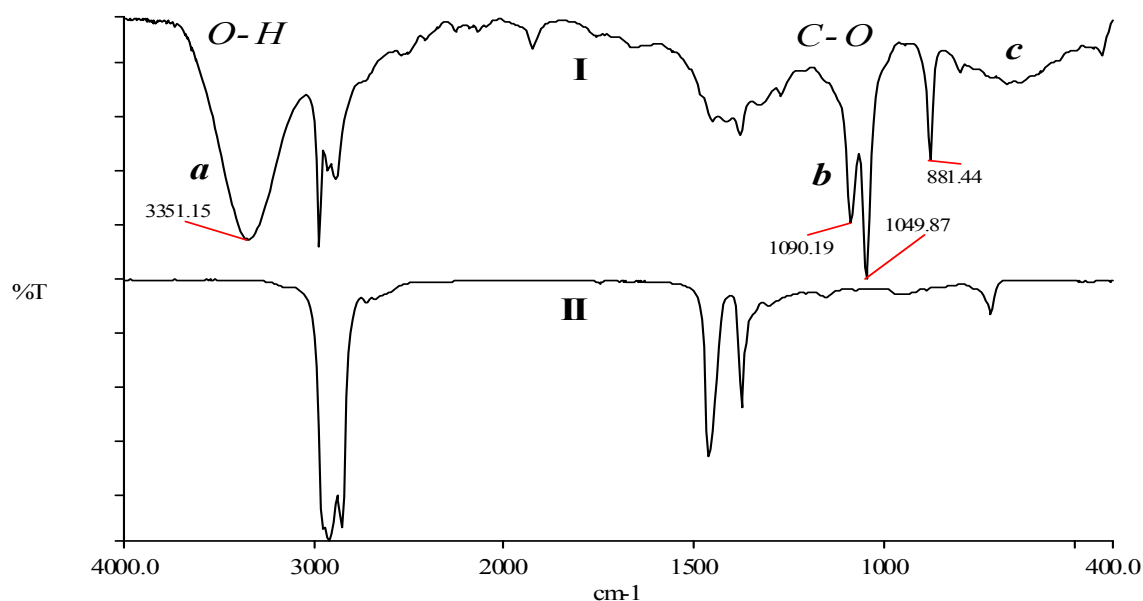
Таркибида ОН-тутган моддаларнинг ИҚ-спектрлари

Гидроксил гуруҳининг валент тебранишлари туфайли юзага келган ютилиш полосалари спектрнинг 3200-3600 см⁻¹ оралиғида кузатилади. Бу полосалар бирмунча кенглиги ва интенсивлигининг катта бўлиши билан бошқа полосалардан ажралиб туради (16-расм). Айрим ҳолларда, табиий бирикмаларнинг циклоалкан ҳалқасида мавжуд бўлган ягона ОН-гуруҳи ўртача интенсивликдаги ютилиш полосасини бериши мумкин.



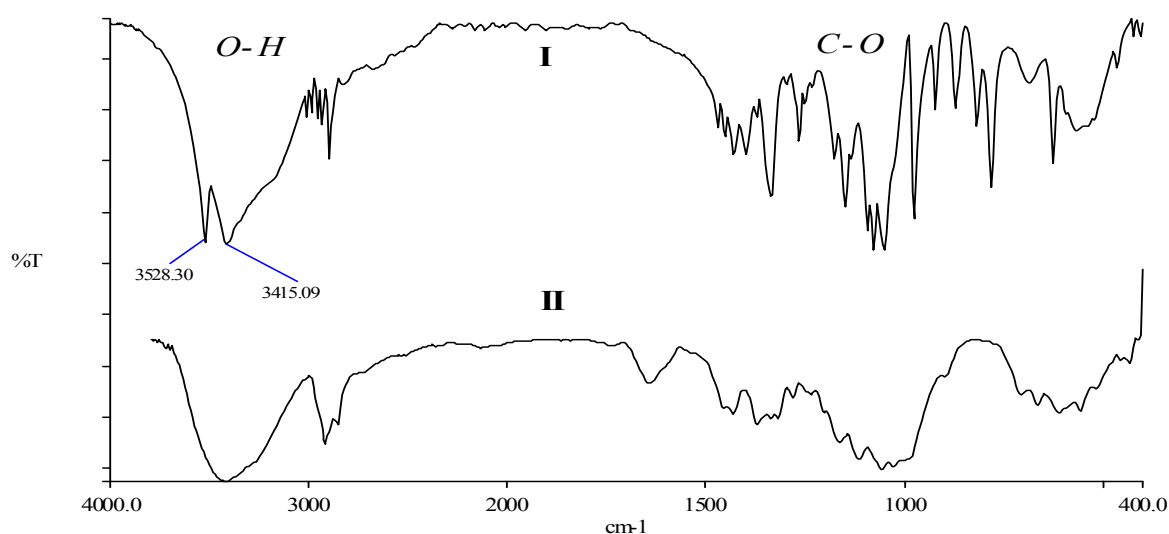
16-Расм. Этил (I), пропил (II) ва бутил (III) спиртларининг ИҚ-спектрлари.

Оддий спиртларнинг ИҚ-спектрида С-Н боғнинг валент ва деформацион тебранишлари туфайли юзага келган полосалар билан бирга, ОН (*a*) ва С-О гуруҳларининг валент тебранишлари (1090 см^{-1}) натижасида юзага келган полосалар ҳам кузатилади (17-расм).



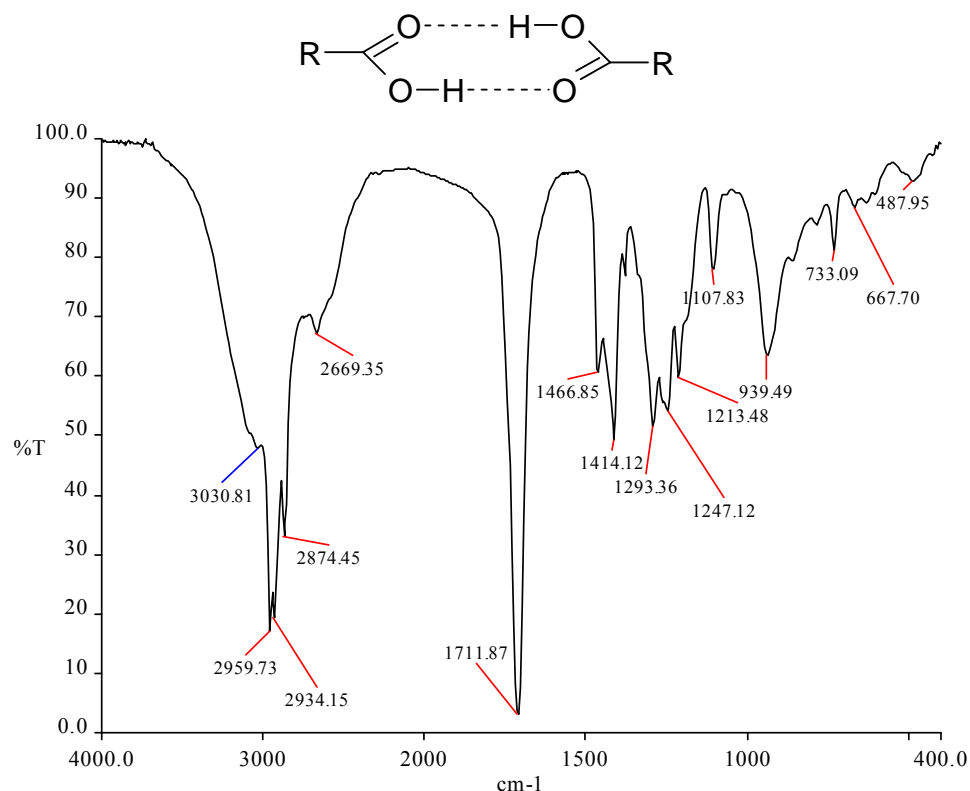
17-Расм. Этанол ва вазелиннинг ИҚ-спектрлари.

Спектрнинг *a*, *b*-полосалари гидроксил гуруҳи тутган моддалар учун характерлидир. ИҚ-спектрнинг $400\text{-}1000\text{ см}^{-1}$ соҳасида ҳар бир мода учун ўзига хос, лекин гидроксил тутувчи моддаларнинг *a* – полосаларидек кўринишга эга бўлган кенг *c*-полосалар ҳам кузатилади. Масалан, 18-расмда D-фруктоза ва целлюлозанинг ИҚ-спектрлари келтирилган. D-фруктоза гидроксилнинг валент тебранишлари туфайли юзага келган полоса икки қисмга ажралган. Спектрнинг юқори частотали қисмидаги ингичка полоса (3528 см^{-1}) водород боғ орқали боғланмаган, эркин ОН гуруҳнинг валент тебранишлари натижасида юзага келган.



18-Расм. D-фруктоза (I) ва целлюлоза (II) ИҚ-спектрлари.

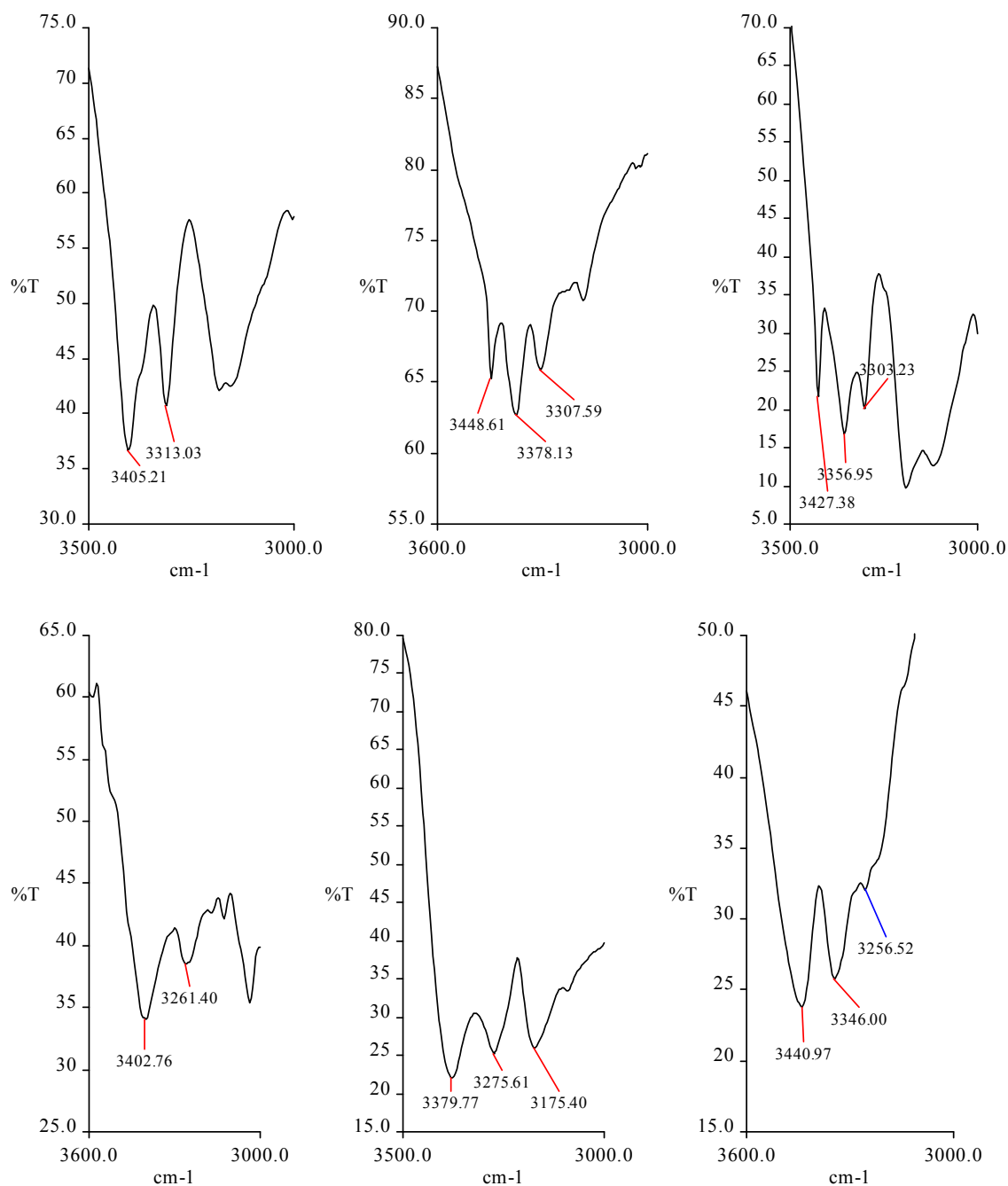
Қуйи частотали қисмидаги (3415 см^{-1}), кенг полоса молекулалараро водород боғда қатнашаётган гидроксил гуруҳининг тебранишлари туфайли юзага келган. Молекулалараро кучли Н-боғ ҳосил қилувчи бирикмаларда ОН-гуруҳнинг полосалари анча кенгайди ва спектрнинг қуйи частотали қисмига силжийди. Масалан, органик кислоталар ўзаро Н-боғ орқали боғланган димер ҳосил қилади, натижада ОН валент тебранишларининг полосаси $3600\text{-}3200\text{ см}^{-1}$ ораликда кузатилмасдан, балки $2800\text{-}2500\text{ см}^{-1}$ соҳада кузатилади (19-расм).



19-Расм. Капрон кислотанинг ИҚ-спектри.

Бирламчи ($-\text{NH}_2$) ва иккиламчи ($>\text{NH}$) амин гуруҳини тутган моддалар ИҚ-спектрларининг таҳлили

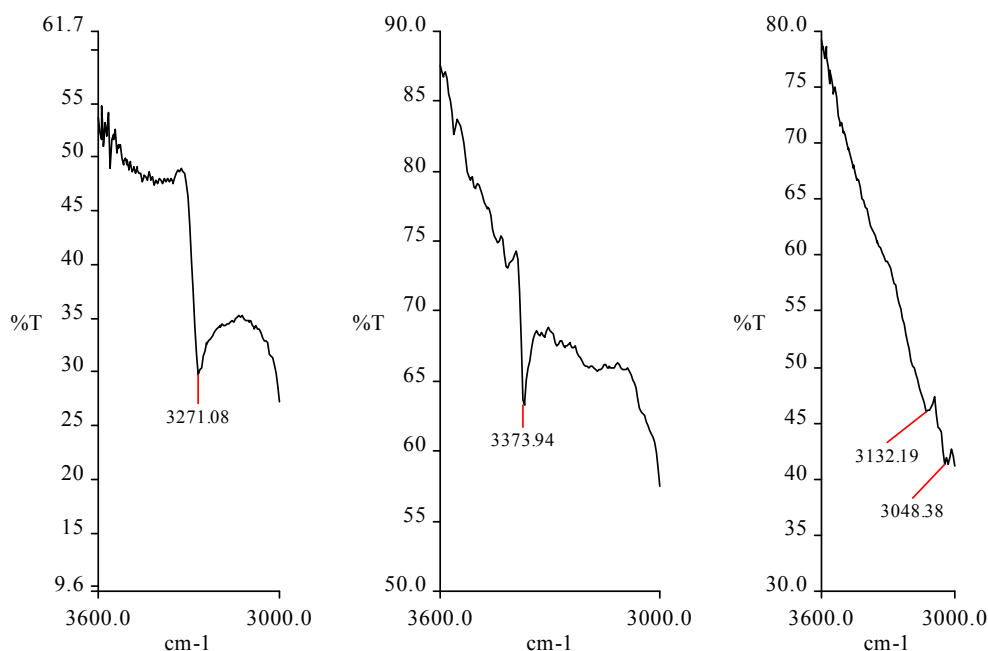
Таркибида $-\text{NH}_2$ ёки $>\text{NH}$ тутган моддалар хилма хил. Лекин, шунга қарамасдан, улар орасидаги умумий ўхшашликларни кузатиш мумкин. Амино гуруҳининг асимметрик ва симметрик валент тебранишлари туфайли юзага келган полосалар, ОН-гуруҳга тегишли полосалардан фарқли ўларок кўпинча иккита ёки учта қисмга ажралган (дублет, триплет) бўлади (20-расм).



20-Расм. NH₂ – гуруҳ тутган моддалар ИҚ-спектрининг 3600-3000 см⁻¹ ораликдаги кўриниши.

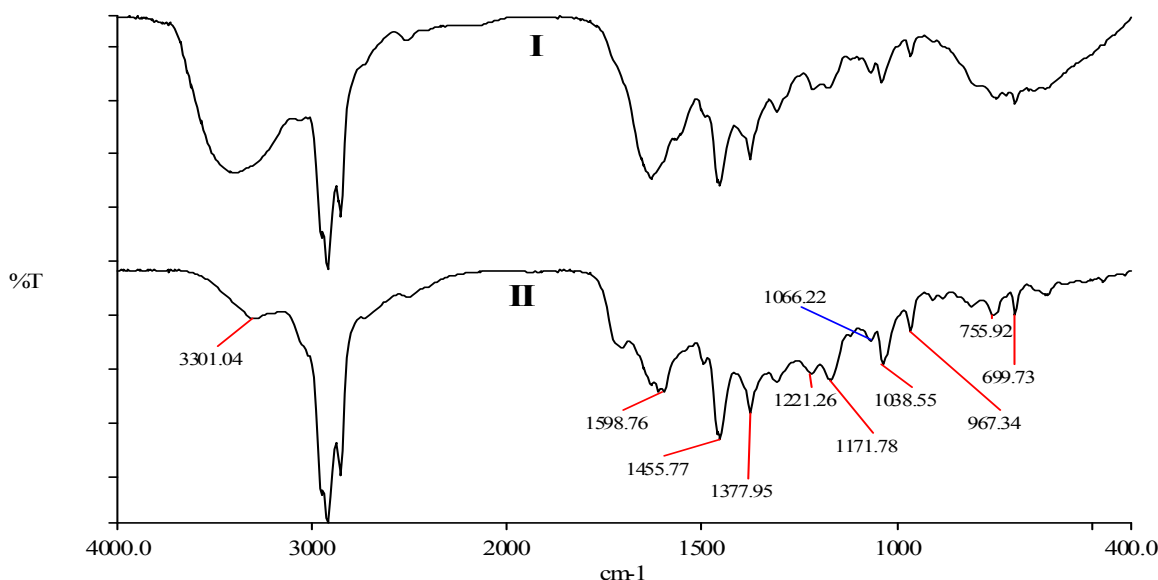
Иккиламчи амина гуруҳини (>NH) тутган моддалар ИҚ-спектрининг 3000-3500 см⁻¹ соҳадаги кўриниши

>NH (=N-H) -гуруҳи валент тебранишлари туфайли юзага келган полосаларнинг интенсивлиги ўртача ёки кам интенсивликка эга бўлади. Ушбу гуруҳни тутган моддалар ИҚ-спектрларининг бир қисми 21–расмда келтирилган.



21-Расм. Иккиламчи амино гуруҳини (>NH) тутган моддалар ИҚ-спектрининг 3000-3500 cm^{-1} ораликдаги кўриниши

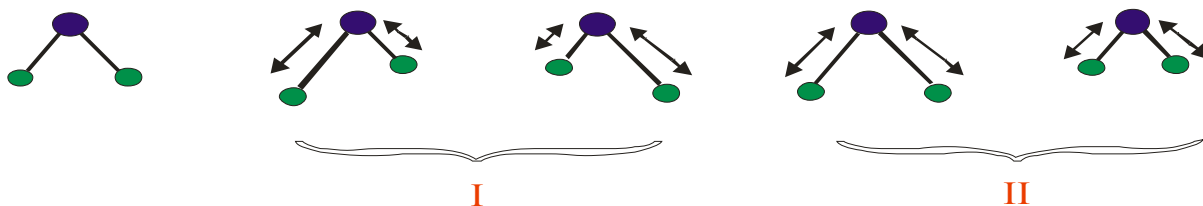
Аминлардаги азот атомининг боғланмаган электрон жуфти кучли асослик хоссасини номоён қилади ва сув молекуласидаги водород атоми билан кучли Н-боғ ҳосил қилади. Бунинг натижасида Н-боғли диэтиламиннинг ИҚ-спектрини (интенсив С-О соҳа йўқлигини ҳисобга олмаганда) бирорта спиртнинг ИҚ-спектрига ўхшатиш мумкин (22-расм, I).



22-Расм. Н-боғли диэтиламиннинг ИҚ-спектри (I) ва унинг бир мунча қиздирилгандан кейинги спектри (II).

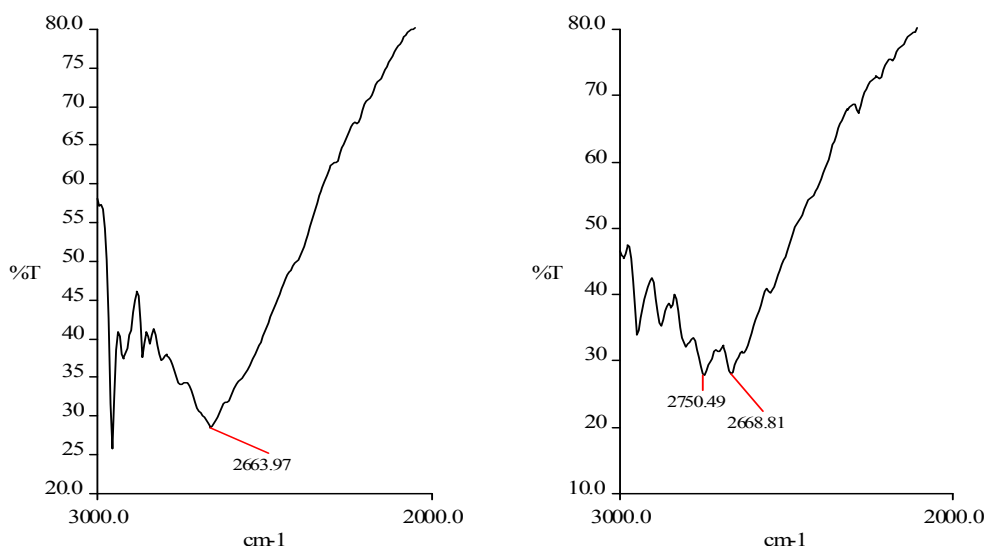
I –чи спектрда >N-H гуруҳининг 3301 ва 1598 cm^{-1} –даги полосалари сув молекуласининг валент ҳамда деформацион тебранишлари туфайли юзага келган полосаларнинг тагида қолиб кетган.

Диэтиламин учун характерли ютилиш соҳалари: $\nu(\text{NH})=3301$, $\delta(\text{NH})=1598$, $\nu^{\text{as}}(\text{N-C})=1171$, $\nu^{\text{s}}(\text{N-C})=1038$ ва $\omega(\text{NH})=700 \text{ cm}^{-1}$.



23-Расм. C- N -C гуруҳининг асимметрик (I, 1171 см^{-1}) ва симметрик (II, 1038 см^{-1}) тебранишлари.

Учламчи, шунингдек, бирламчи ва иккиламчи аминларнинг тузилишини ИҚ-спектрлари ёрдамида аниқлашнинг энг қулай усулларида бири, уларни гидрохлорид ёки гидробромид ҳолатига ўтказиб, ҳосил бўлган тузнинг ИҚ-спектрини олишдан иборатдир. Бундай ҳолларда, ИҚ-спектрнинг $2500\text{-}2800 \text{ см}^{-1}$ оралиғида тўртламчи азот атоми мавжудлигидан далолат берувчи интенсив битта-иккита ёки ўртача интенсивликдаги жуда кўп полосалар кузатилади (24-расм).

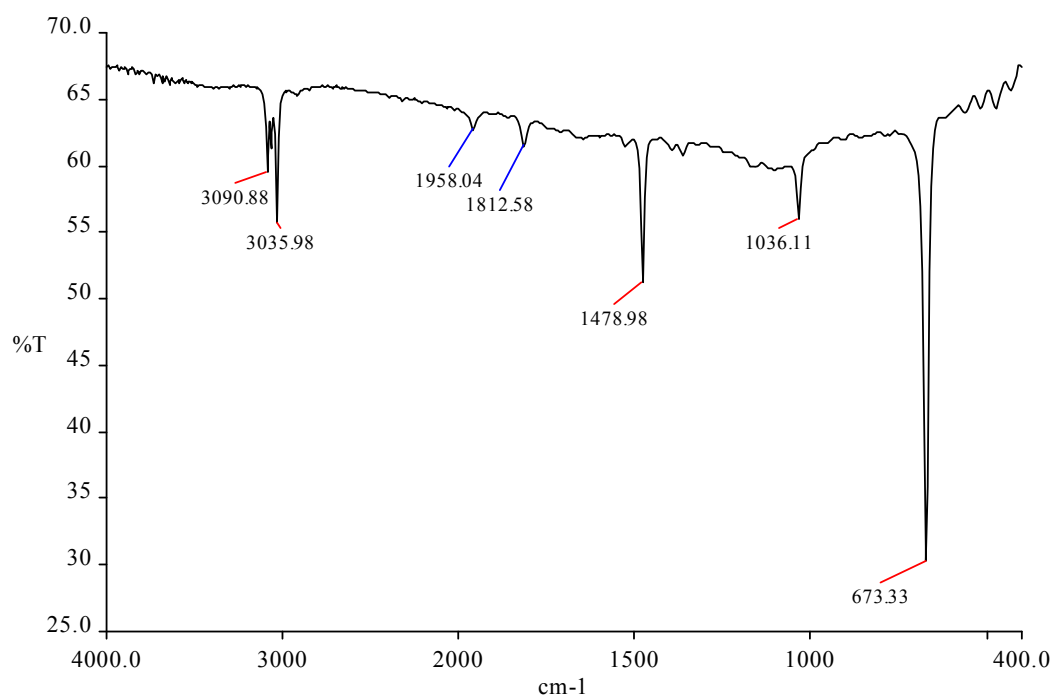
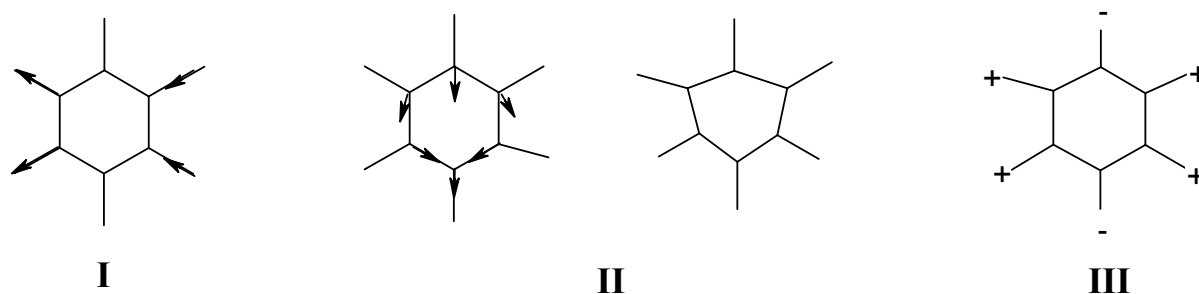


24-расм. ИҚ спектрнинг молекуланинг таркибида тўртламчи азот атомининг мавжудлигидан далолат берувчи ютилиш соҳаси.

Ароматик бирикмаларга хос ютилиш соҳалари

Бензол молекуласида интенсив полосалар спектрнинг учта соҳасида жойлашган: **I** - ҳалқадаги тўртта C-H боғларнинг валент тебранишлари туфайли юзага келган полосалар ($3036, 3091 \text{ см}^{-1}$); **II** – бензол ҳалқасидаги C=C боғларнинг ҳалқа текислиги бўйлаб тебранишидан юзага келган полосалар (1479 см^{-1}); **III** – бензол ҳалқасининг ҳалқа текислигидан бошқа текислик бўйлаб юз берадиган тебраниши натижасида юзага келган полоса (673 см^{-1}). Ароматик бирикмаларнинг $1650 - 2000 \text{ см}^{-1}$ частоталар оралиғида жойлашган ва обертон частоталар туфайли юзага келган, жуда паст

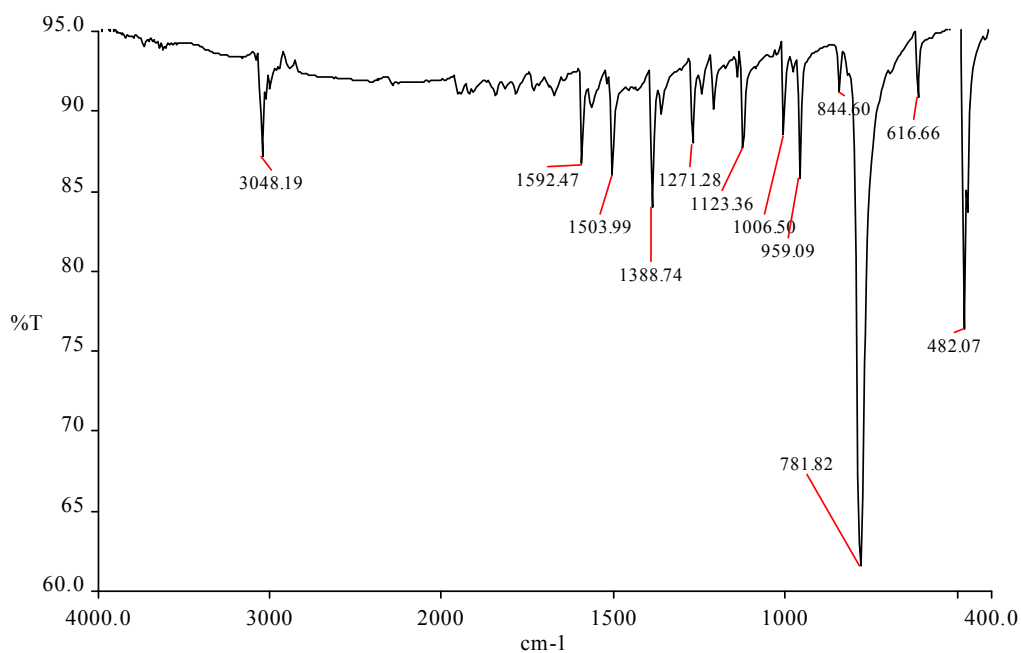
интенсивликка эга бўлган полосаларининг шакли ароматик ҳалқадаги ўринбосарларнинг жойини ва сонини аниқлашда жуда сезгир ҳисобланади.



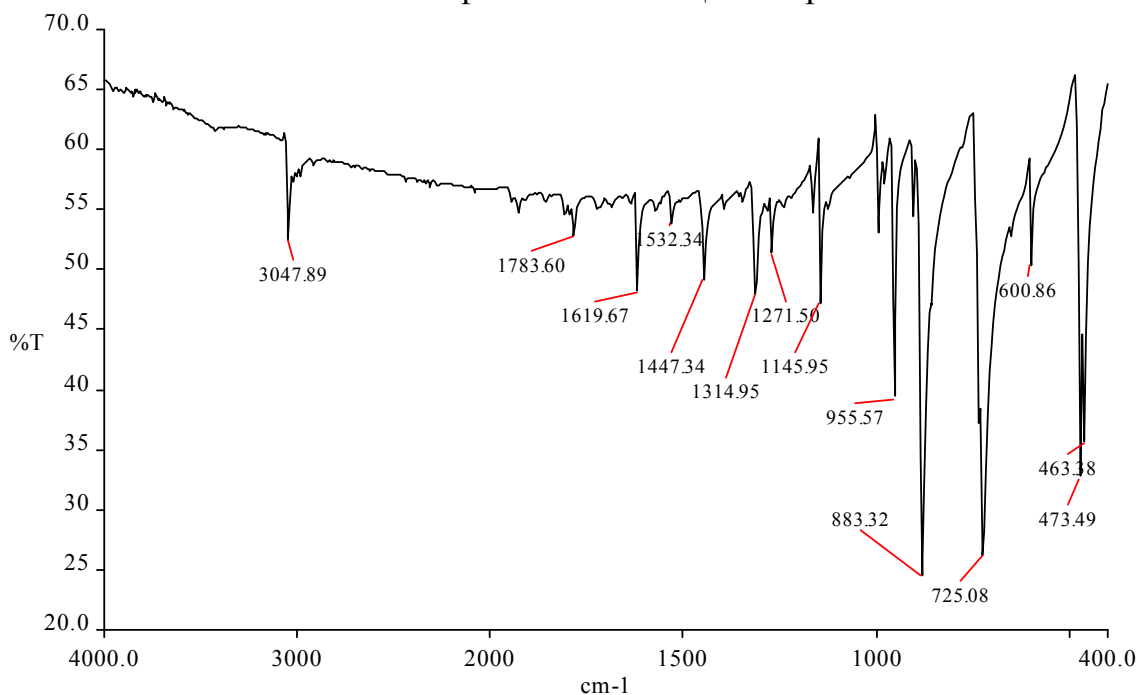
25-Расм. Бензолнинг ИҚ-спектри.

Ароматик ҳалқа сонининг ортиши билан ИҚ – спектрнинг куйи частотали қисмида ютилиш полосаларининг сони кўпаяди. Буни нафталин ва антраценларнинг ИҚ-спектрларида кўришимиз мумкин. Спектрдаги 3048 см⁻¹ атрофидаги полоса нафталин молекуласидаги С-Н боғларнинг валент тебранишлари туфайли юзага келган. 781 см⁻¹ –даги интенсив соҳа нафталин ҳалқасининг ҳалқа текислигидан бошқа текисликда қилган тебранишлари натижасида юзага келган (26-расм).

Антрацен ИҚ-спектридаги энг интенсив полосалар 725, 883 см⁻¹ атрофларида кузатилади. Бу полосалар антрацен молекуласининг ҳалқа текислигидан бошқа текислик бўйлаб қилаётган тебранишидан юзага келган. Спектрнинг 3047 см⁻¹ яқинида жойлашган полосаси ҳалқа С-Н боғларининг валент тебранишлари натижасида ҳосил бўлади. Антрацен молекуласининг ҳалқа текислигида бўлаётган тебранишларига мос келувчи ютилиш полосалари спектрнинг 1400-1620 см⁻¹ оралиғида кузатилади (27-расм).



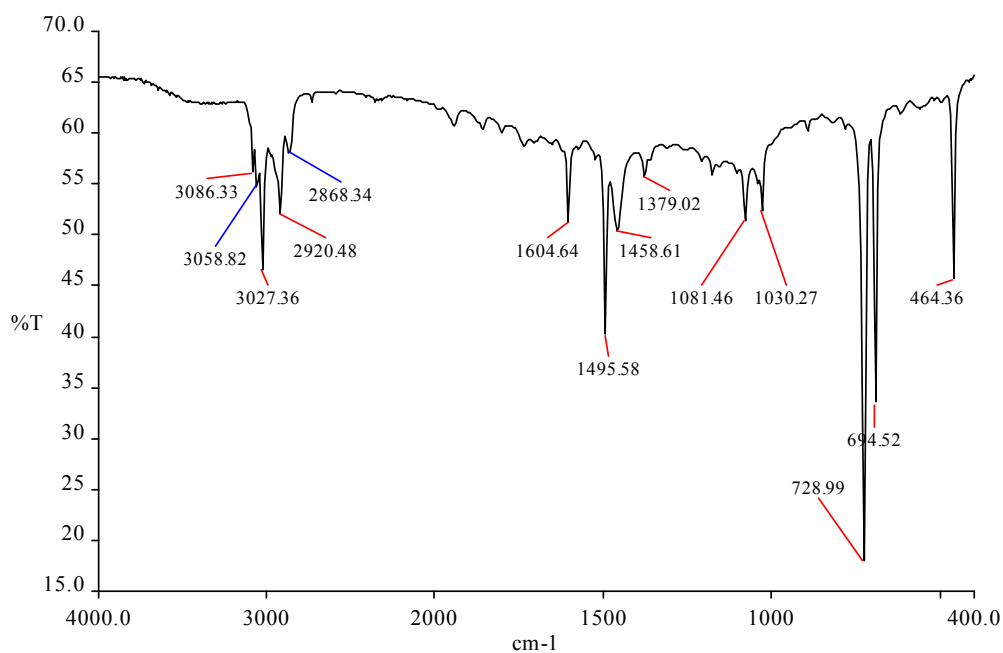
26-Расм. Нафталиннинг ИҚ-спектри.



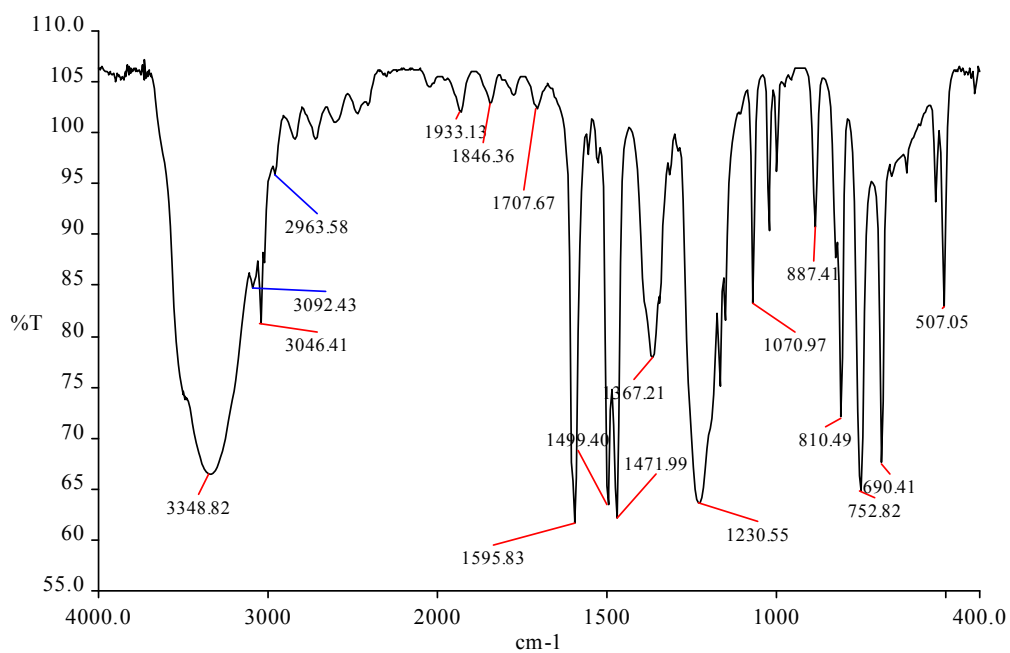
27-Расм. Антраценнинг ИҚ-спектри.

Юқорида айтганимиздек ароматик ҳалқасидаги ўринбосарлар сонини аниқлашда спектрнинг $1650 - 2000 \text{ cm}^{-1}$ соҳаси катта аҳамият касб қилади. Шунинг учун, бир нечта бензол ҳосилаларининг ИҚ-спектрларини келтириш мақсадга мувофиқдир.

Толуол спектрига нисбатан фенол спектрида бу соҳада жойлашган полосалар бир мунча интенсив (28-29 расмлар).

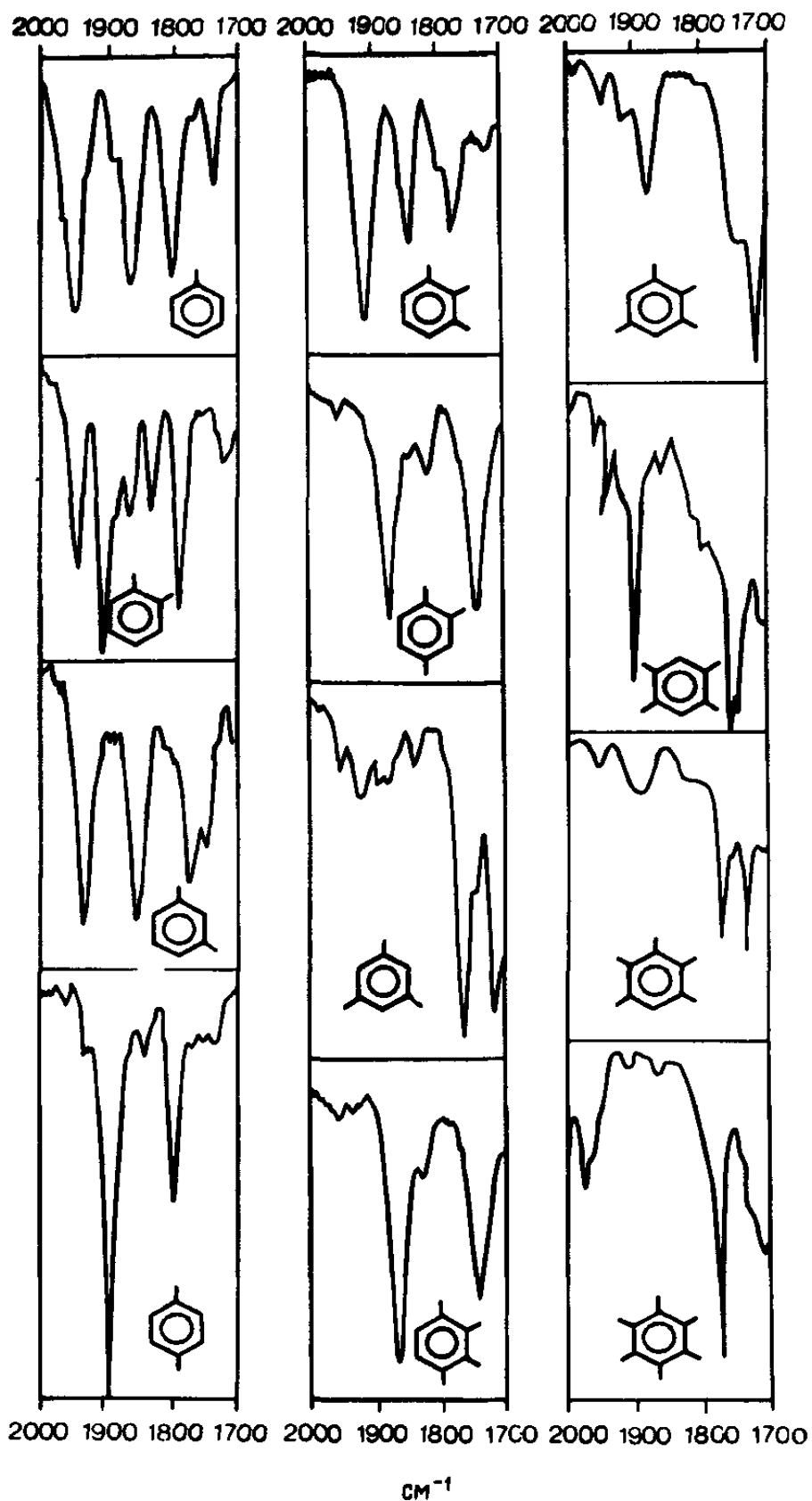


28-Расм. Толуолнинг ИҚ-спектри.



29-Расм. Фенолнинг ИҚ-спектри.

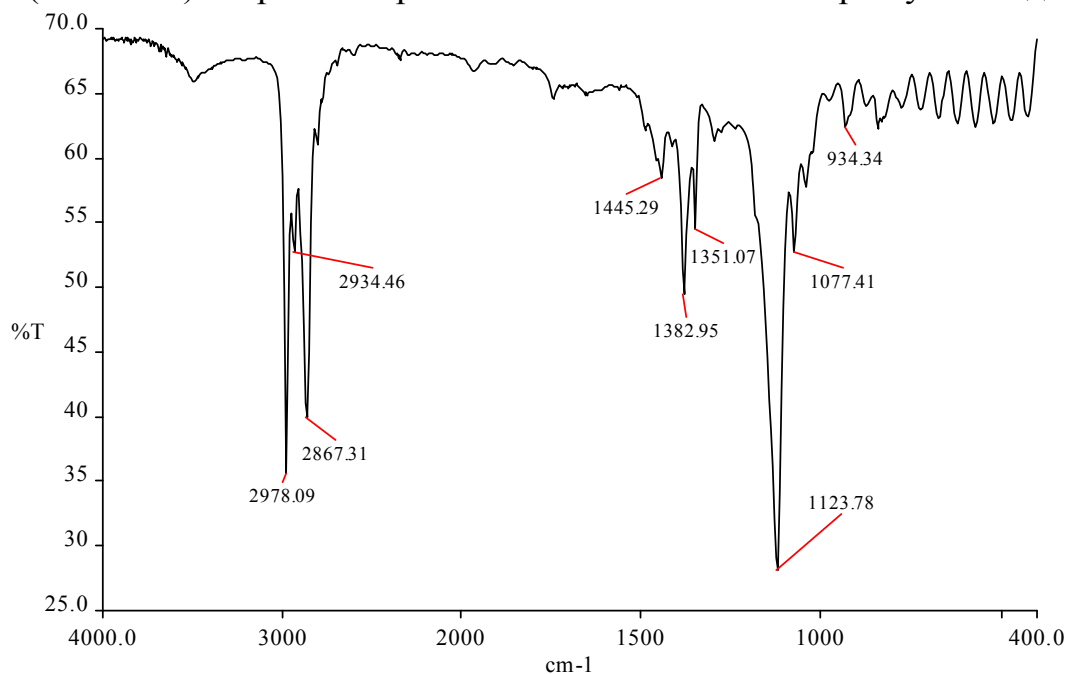
Ўринбосарларнинг ҳалқадаги жойини аниқлашда бу полосаларнинг частота қийматларидан кўра умумий кўриниши, яъни шакли маълумотларга бой ҳисобланади. Моно алмашган бензол ҳосилалари спектрларининг айти шу соҳасида тўртта полоса кузатилади (30-расм.). Бунга толуол ва фенол спектрларини мисол қилишимиз мумкин (28 ва 29-расмлар). Адабиётларда бензолнинг икки, уч, тўрт, беш ва олти алмашган ҳосилалари яхши ўрганилган ва изланишлар натижасида спектрнинг $1700-2000 \text{ cm}^{-1}$ соҳадаги кўриниши ҳалқадаги ўринбосарларнинг жойига ва сонига боғлиқ равишда 30-расмдагидек бўлиши аниқланган.



30-Расм. ИҚ спектрнинг 1700-2000 см⁻¹ частоталар оралиғидаги полосаларининг ароматик ҳалқадаги ўринбосарларнинг жойига ва сонига боғлиқ равишда кўриниши.

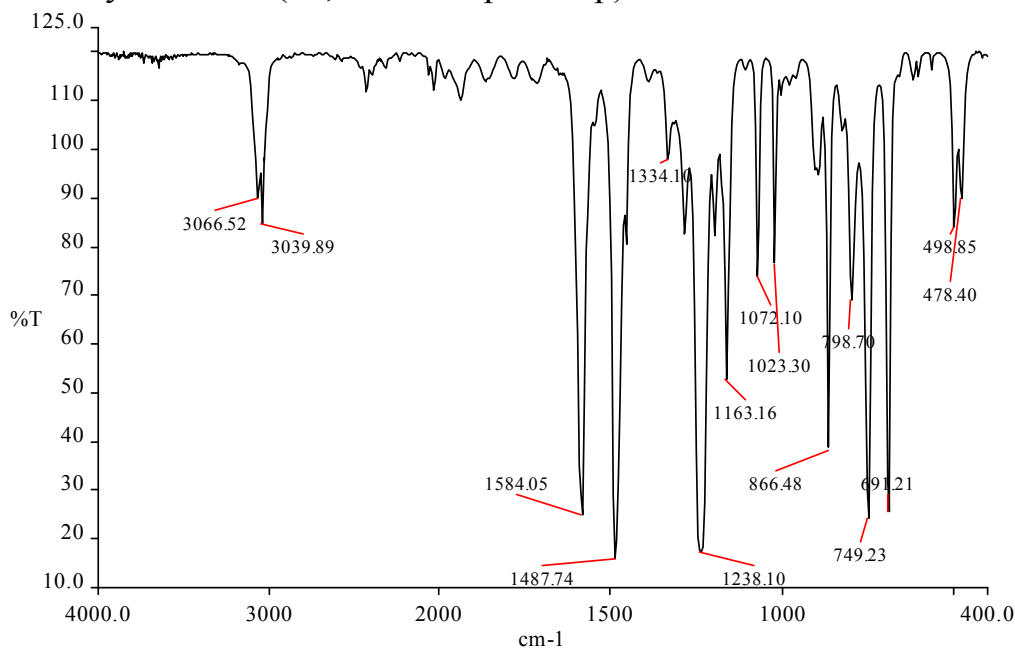
Оддий ва мураккаб эфирларнинг ИҚ-спектрлари

Оддий эфирларнинг ИҚ-спектрларида метил, метилен гуруҳларининг валент ($2800-3000\text{ см}^{-1}$), деформацион ($1300-1500\text{ см}^{-1}$) ҳамда С-О гуруҳининг валент (1123 см^{-1}) тебранишларига мос ютилиш полосалари кузатилади.

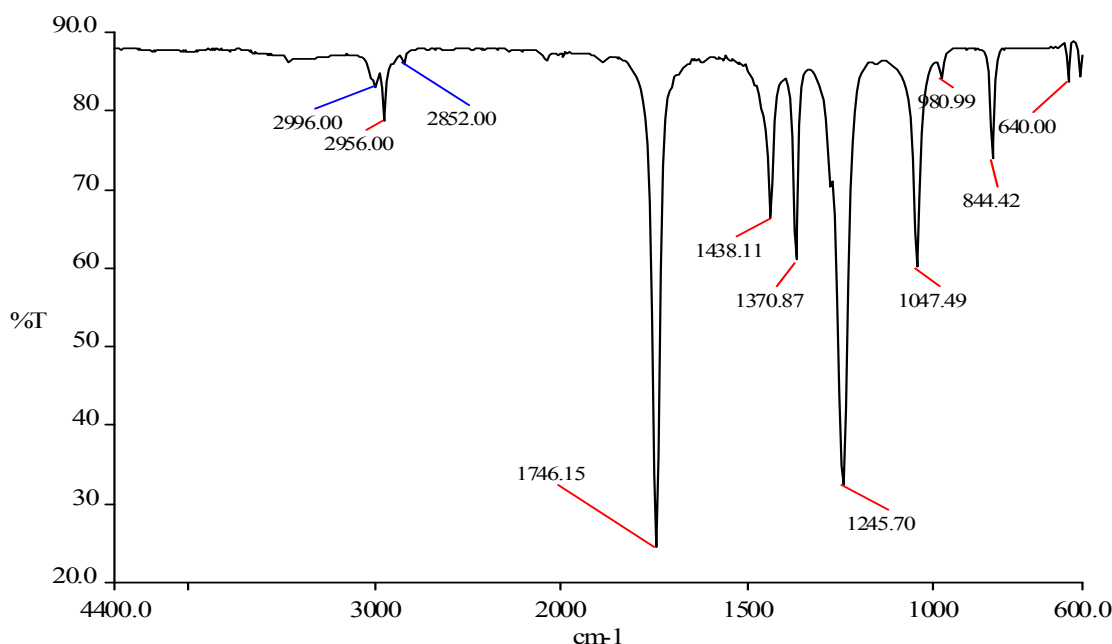


31-Расм. Диэтил эфирнинг ИҚ-спектри.

Дифенил эфир ва метил ацетатнинг ИҚ-спектрларида С-О гуруҳининг полосаси диэтил эфирга нисбатан анча юқорида, яъни мос равишда 1238 ва 1245 см^{-1} -да кузатилади (31, 32 ва 33-расмлар).



32-Расм. Дифенилэфири (Ph-O-Ph) ИҚ-спектри



33-Расм. Метил ацетатнинг ИҚ-спектри.

***C=O* гуруҳининг ютилиш соҳалари**

Юқорида келтирилганидек (1-жадвал) C=O гуруҳининг валент тебранишларига тегишли ютилиш полосалари ИҚ-спектрнинг 1650-1820 см⁻¹ оралиғида кузатилади. Бу тебранишга тегишли полосанинг интенсивлиги ИҚ спектрдаги бошқа полосаларникидан катта бўлади. Бундай гуруҳларга эга бўлган бирикмалар жуда хилма-хилдир. Тўйинган ва тўйинмаган альдегидлар, ациклик (циклик) кетонлар ва дикетонлар, алифатик (ароматик) монокарбон ҳамда дикарбон кислоталар, ангидридлар, амидлар ва бошқалар. Ҳар бир синфнинг C=O гуруҳи учун маълум бир частоталар оралиғини белгилаш мумкин. Бу бирикмаларга электронодонор ёки электроноакцептор ўринбосарларнинг киритилиши C=O гуруҳ ютилиш полосасининг ўрнини сезиларли даражада ўзгартириши мумкин.

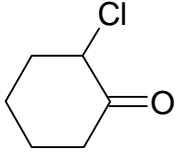
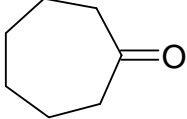
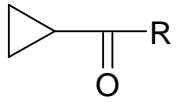
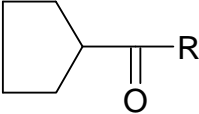
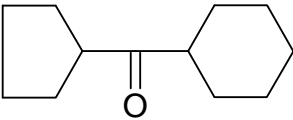
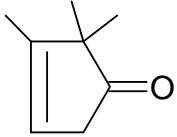
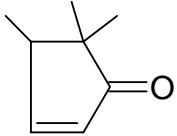
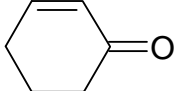
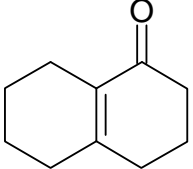
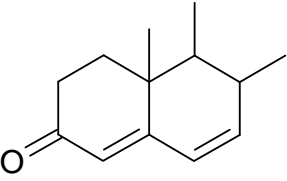
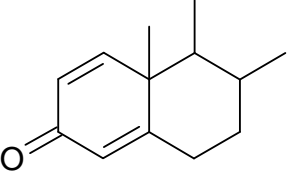
2-Жадвал. Карбонил гуруҳи тутувчи моддалардаги C=O валент тебраниш частоталари*

№	Моддалар синфи	Умумий структура тузилиши	ν , см ⁻¹
1	Тўйинган алифатик кетонлар	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}$	1715
		$\text{CH}_2\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}$	1724

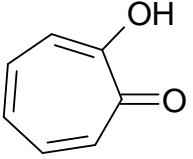
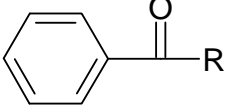
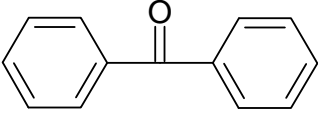
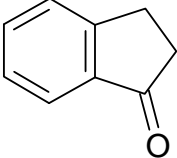
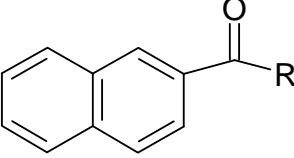
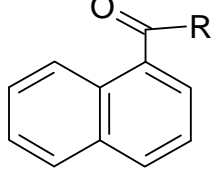
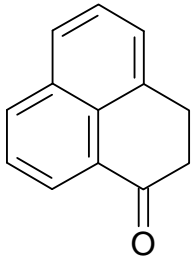
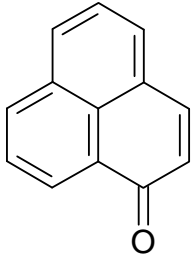
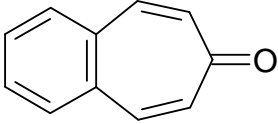
2-жадвалнинг давоми

2	Тўйинмаган алифатик кетонлар		1677
			1670
			1660
3	Циклик тўйинган кетонлар		1784
			1745
			1750
			1755
			1764
			1715
			1734
			1757

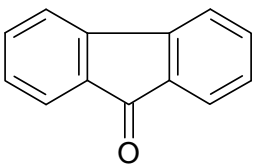
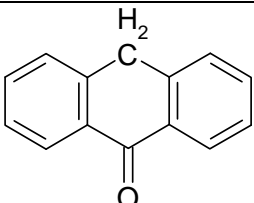
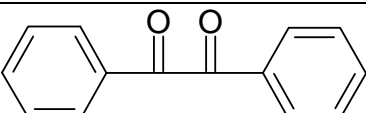
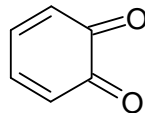
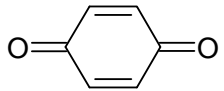
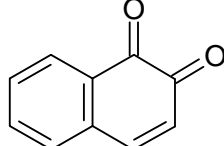
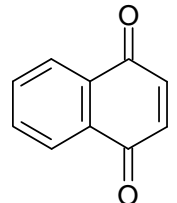
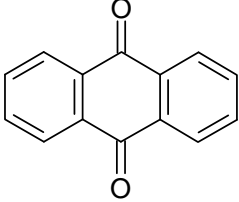
2-жадвалнинг давоми

			1738
			1705
			1698
			1708
			1703
4	Тўйинмаган циклик кетонлар		1754
			1716
			1680
			1660
			1665
			1666

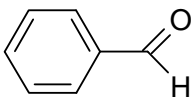
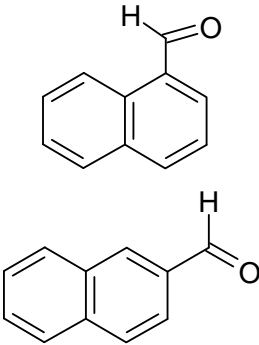
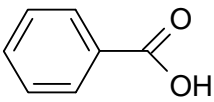
2-жадвалнинг давоми

			1615
5	Ароматик кетонлар		1690
			1665
			1709
			1685
			
			1670
			1637
			1641

2-жадвалнинг давоми

			1720
			1667
6	Алифатик дикетонлар	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}$	1721
	Ароматик дикетонлар		1681
8	Хинонлар		1669
			1667
			1678
			1675
			1678
9	Тўйинган альдегидлар	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$	1730
10	Тўйинмаган альдегидлар	$\text{R}-\underset{\text{H}}{\text{C}}=\underset{\text{H}}{\text{C}}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$	1685
		$\text{R}-\underset{\text{H}}{\text{C}}=\underset{\text{H}}{\text{C}}-\underset{\text{H}}{\text{C}}=\underset{\text{H}}{\text{C}}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$	1677

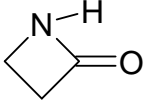
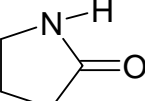
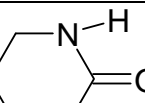
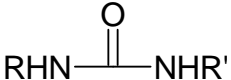
2-жадвалнинг давоми

11	Ароматик альдегидлар		1707
			1700
12	Тўйинган карбон кислоталар	$R-C(=O)OH$	1735 (мономер) 1710 (димер)
		$ClCH_2-C(=O)OH$	1736
		$Cl_2CH-C(=O)OH$	1751
		$Cl_3C-C(=O)OH$	1784
13	Тўйинмаган карбон кислоталар	$R-C(=C)H-C(=O)OH$	1718 (мономер) 1690 (димер)
14	Ароматик карбон кислоталар		1720 (мономер) 1685 (димер)
15	Карбоксил иони	$(R-COO)^-$	1550-1610 1300-1400
16	Тўйинган карбон кислоталар эфирлари	$R-COOR$	1730-1750
		$RCH(OOR)_2$	1761
		$ROOC-COOR$	1757
		CCl_3-COOR	1768
17	Тўйинмаган карбон кислоталар эфирлари	$R-CH=CH-COOR$	1720
		$R-CO-O-CH=CH-R$	1770
		$R-CH=CH-CH=CH-COOR$	1710
18	Ароматик карбон кислоталар эфирлари	$Ar-COOR$	1720
		$R-COOAr$	1770
		$Ar-COOAr$	1746
19	Кетокислота ва кетозфирлар	$R-CO-COOH$	1745
		$R-CO-COOR$	1748

2-жадвалнинг давоми

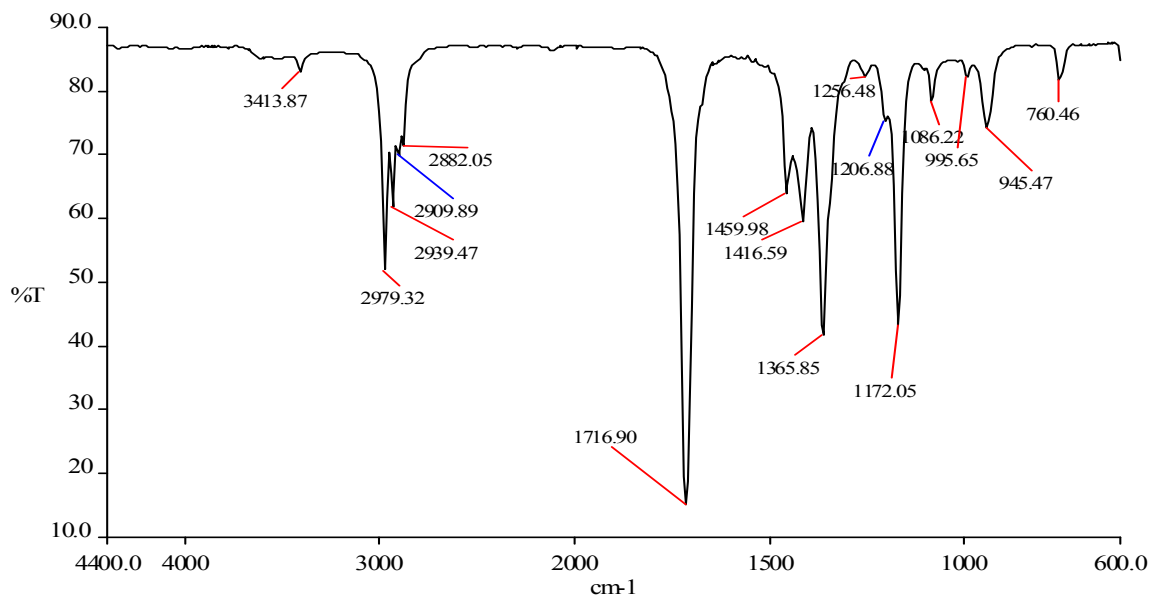
20	Карбонат кислота эфирлари		1756
21	Лактонлар		1818
			1775
			1800
			1750
			1740
22	Ангидридлар		1824 1748
			1780 1725
			1808 1745
			1794 1732
			1845 1775
23	Пероксидлар, перкислоталар ва уларнинг эфирлари	 (R-CO-O-O-CO-R)	1813 1786

2-жадвалнинг давоми

		R-CO-O-O-CO-Ar	1804 1772
		Ar-CO-O-O-CO-Ar	1794 1772
		Ar-CO-O-OH	1732
		R-CO-O-OR	1783
		Ar-CO-O-OR	1758
24	Галоген ангидридлари	R-CO-Cl	1810
		R-CO-Br	1812
		Ar-CO-Cl	1773
		Ar-CO-Br	1736
25	Амидлар	R-CO-NH ₂	1660
		Амид I (ν C=O), амид II (δ NH ₂)	1630
		R-CO-NHR'	1630-1680 1550
		R-CO-NR' ₂	1630-1680
26	Лактамлар		1730-1760
			1700-1560
			1650
27	Мочевина ҳосилалари		1635-1660 1575-1615

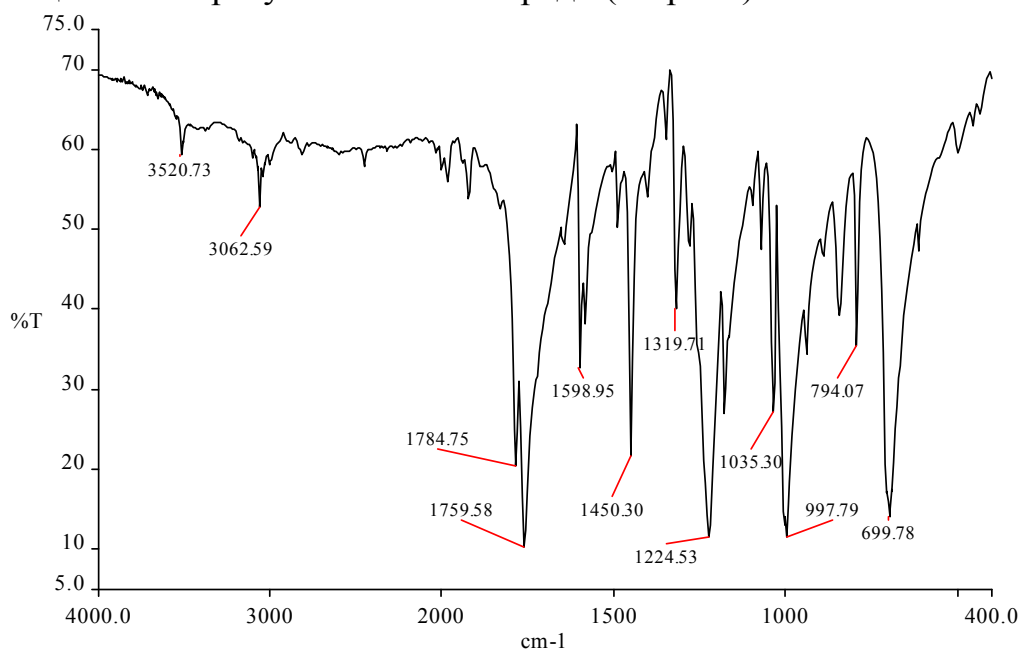
* Олдинги адабиётларда келтирилган частоталар оралиги эритувчиларда олинган спектрлар асосида тузилган. Шунинг учун ҳам KBr-да олинган частоталар қиймати озроқ фарқ қилиши мумкин.

Метилэтилкетоннинг ИҚ спектрида C=O гуруҳнинг валент тебранишига тегишли интенсив ютилиш полосасининг частотаси ν (C=O) = 1717 см⁻¹ –га тенг. Ушбу тебранишнинг интенсивлиги паст бўлган обертоп полосаси 3414 см⁻¹ да кузатилади. Спектрнинг 2800-3000 ва 1300-1500 см⁻¹ тўлқин сони ораликларидаги полосалар метил, метилен гуруҳларининг валент ҳамда деформацион тебранишлари туфайли юзага келади. Кетон гуруҳидаги углерод атомига боғланган C-C гуруҳнинг валент тебранишларига тегишли полоса 1172 см⁻¹ частота атрофида кўринади.

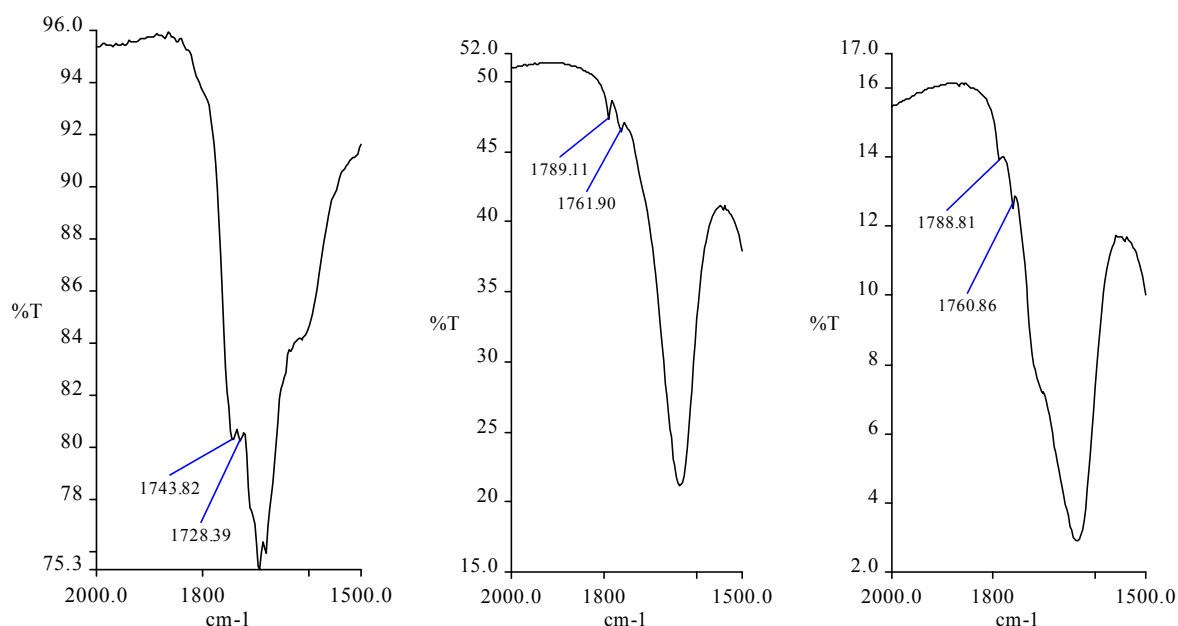


34-Расм. Метилэтилкетоннинг ИҚ-спектри.

Пероксидлар ҳамда ангидридларнинг ИҚ-спектрларида иккита C=O гуруҳга тегишли иккита полоса кузатилади (35-расм) ва бу уларни аниқлашни бир мунча осонлаштиради (36-расм).



35-Расм. Бензоил пероксид ($C_6H_5CO-OO-OCN_5C_6$)нинг ИҚ-спектри.



36-Расм. Моддалар аралашмасида молекуласида иккита C=O гуруҳ тутган бирикмалар мавжудлигини ИҚ-усулида аниқлаш.

Индивидуал модда ИҚ - спектрини тавсифлаш усуллари

ИҚ-спектрларни илмий мақолаларда, бакалаврларнинг малакавий битирув ишларида ва магистрлик диссертацияларида қисқа кўринишда, жадвал кўринишида ва қисман ёки батафсил таҳлил қилган ҳолда ёки график (расм) кўринишида келтириш мумкин.

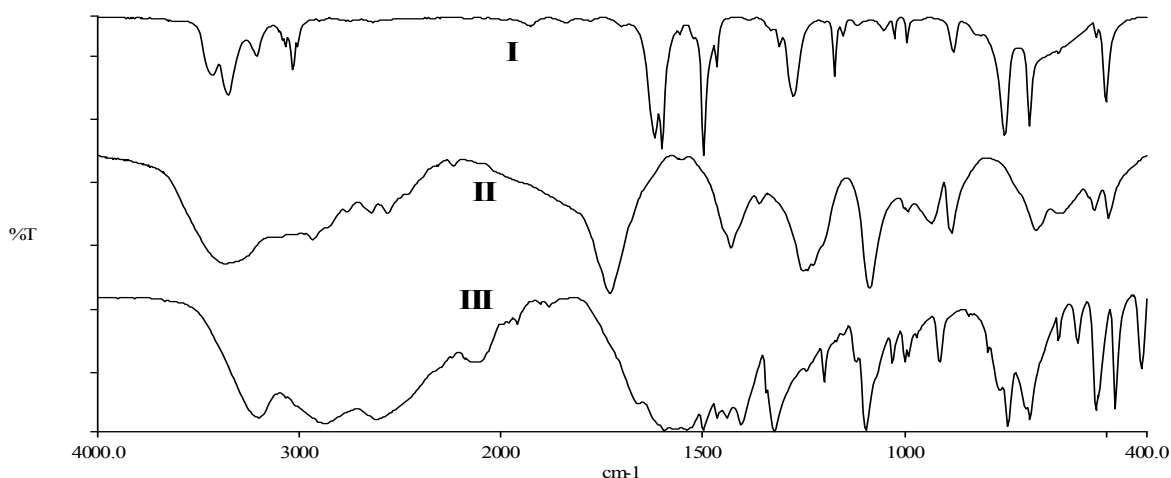
Одатда, илмий мақолаларда янги синтез қилинган ёки ажратиб олинган моддаларнинг ИҚ-спектрини тавсифлаш асосий ютилиш соҳаларининг частоталарини келтириш билан чегараланади. Масалан, ИҚ-спектр: ν , cm^{-1} – 3200 (ОН), 2880 - 2950 (CH_3 , CH_2), 2220 ($\text{C}\equiv\text{N}$), 1670 ($\text{C}=\text{O}$). Бирикманинг тузилишини аниқлашда ИҚ-усули етакчи ўрин эгаллаган бўлса, спектрларни график кўринишида келтириш мақсадга мувофиқдир. Бунга мисоллар кейинги варақларда келтирилади.

Бошланғич ва охириги модда спектрларини таққослаш

Реакциянинг қандай бориши ва қанақа реакция маҳсулоти ҳосил бўлиши назарий жиҳатдан маълум бўлса, дастлабки моддалар ва реакция маҳсулотининг ИҚ-спектрларини таққослаш асосида сиз кутган натижага эришган ёки эришмаганлигини баҳолашингиз мумкин.

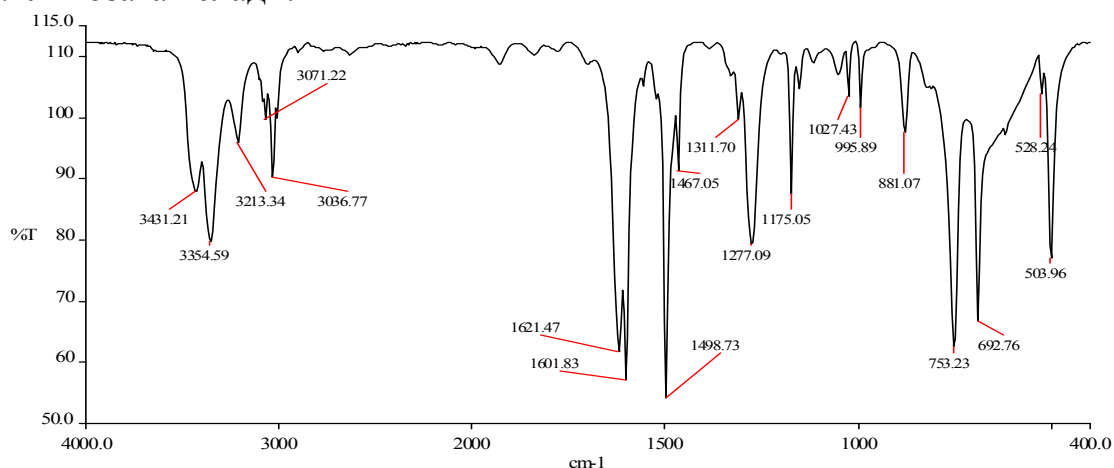
Мисол тариқасида Ўзбекистон миллий университети кимё факультети ўқитувчиси, кимё фанлари номзоди Ахмедов Ўрол томонидан тақдим қилинган дастлабки (анилин, гликол кислота) ва охириги моддаларнинг ИҚ-спектрлари таҳлилин келтирамиз.

Бир қарашдаёқ реакция маҳсулоти спектрининг дастлабки моддалар спектринан фарқ қилишини уларга тегишли спектрларни таққослаш асосида (37-расм) кўриш мумкин.



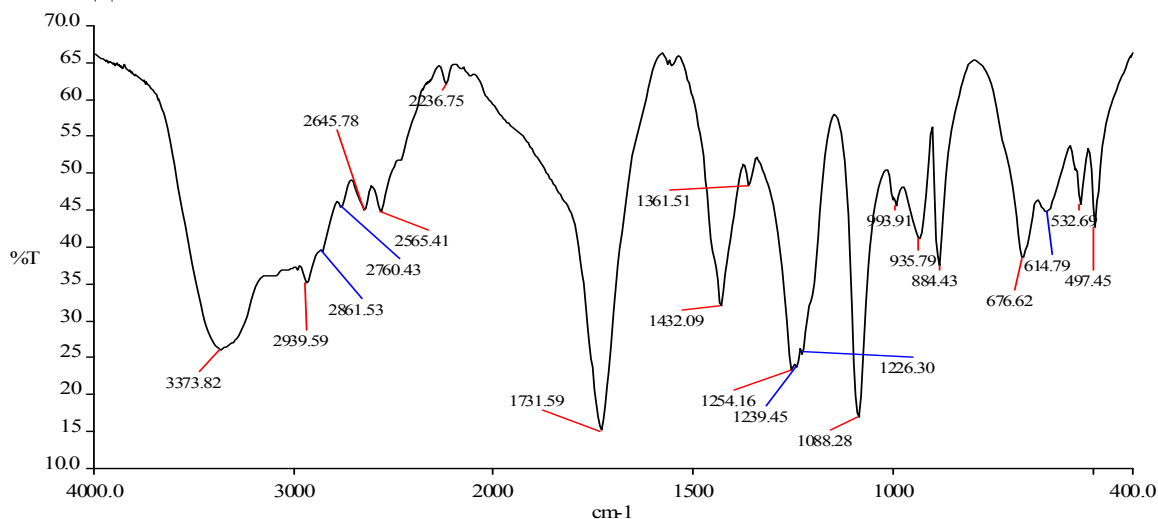
37-Расм. Дастлабки ва охириги моддаларнинг ИҚ-спектрлари. I-Анилин, II-гликол кислота, III-реакция маҳсулоти.

Анилиннинг ИҚ-спектрида амино гуруҳнинг асимметрик ва симметрик валент тебранишлари натижасида юзага келган полосалар $3200-3500\text{ см}^{-1}$, шу гуруҳнинг деформацион тебранишларига тегишли полосалар $1621, 1175$ ва 881 см^{-1} частоталарда кузатилади. Спектрнинг $3000-3100\text{ см}^{-1}$ соҳасида ароматик ҳалқа С-Н боғларининг валент тебранишлари туфайли юзага келган полосалар мавжуд. Ароматик ҳалқанинг ҳалқа текислигида бўлаётган тебранишининг натижасида 1601 ва 1498 см^{-1} ларда кўринадиган ютилиш полосалари ҳосил бўлади. Моно алмашган ароматик бирикмалар учун характерли бўлган интенсив полосалар спектрнинг $650-770\text{ см}^{-1}$ соҳасида кузатилади. Бу полосалар ароматик ҳалқанинг ҳалқа текислигидан бошқа текисликда бўлаётган тебранишлари натижасида юзага келган. Амино гуруҳнинг урчуқсимон айланма тебраниши туфайли юзага келган ўртача интенсивликдаги ва бирмунча кенг полосалари ҳам айти шу соҳада ётади. Спектрдаги (38 -расм) 1277 см^{-1} полоса С-N гуруҳнинг валент тебранишлари туфайли юзага келади.

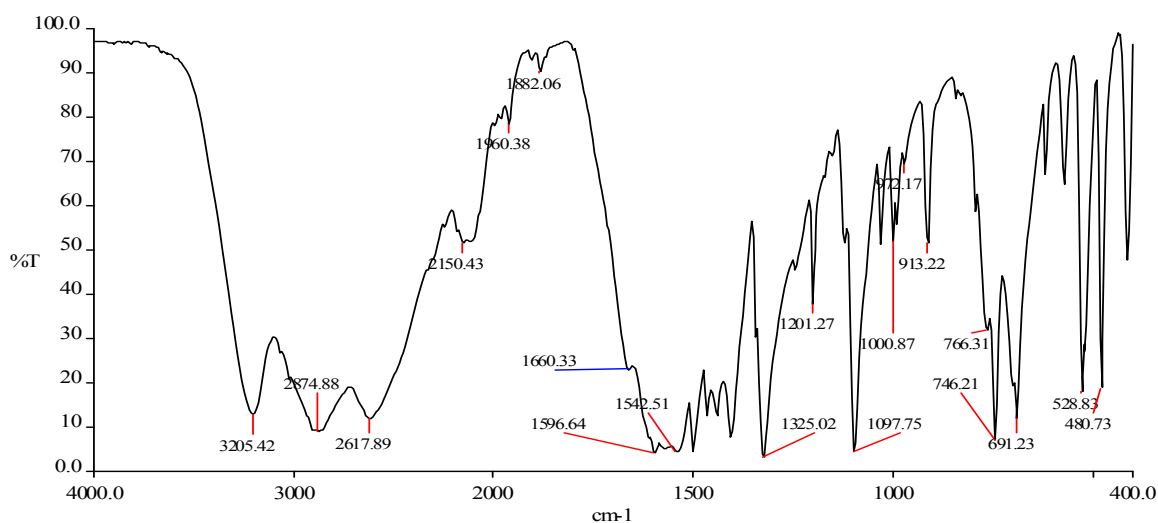


38-Расм. Анилиннинг ИҚ-спектри.

Гликол кислота ИҚ-спектрида 2500-2800 см^{-1} орасида жойлашган кенг полосанинг борлиги бу кислотанинг димер ҳолатда эканлигидан далолат беради. Иккинчи гидроксил ($\text{HO}-\text{CH}_2-$) гуруҳнинг валент тебранишлари натижасида ҳосил бўлган полоса 3373 см^{-1} -да жойлашган. Спектрдаги 2939 ва 2861 см^{-1} полосалар мос равишда метилен гуруҳининг асимметрик ҳамда симметрик тебранишларига тегишли. Яримкенгиг ва интензивлиги нисбатан катта бўлган 1200-1300 см^{-1} оралиғидаги полоса карбоксил гуруҳидаги $\text{C}-\text{O}$ боғнинг валент тебранишлари туфайли юзага келган. Унинг ёнидаги частотаси 1088 см^{-1} бўлган полоса эса $\text{H}_2\text{C}-\text{O}$ боғнинг валент тебранишлари натижасида ҳосил бўлган. Кўпчилик ҳолларда гидроксил гуруҳининг деформацион тебранлари натижасида юзага келган паст интензивликдаги полоса, метилен гуруҳининг деформацион полосаларининг остида кўринмай қолади. Лекин, гликол кислотанинг спектрида бу полоса 1361 см^{-1} атрофида кузатилади.



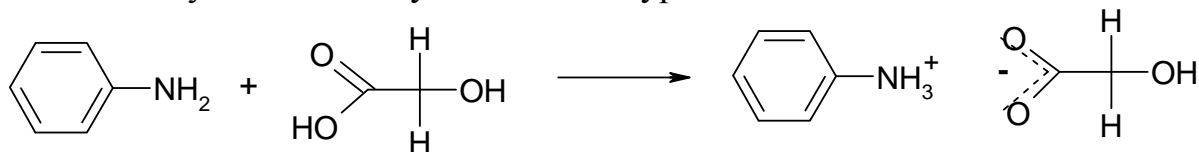
39-Расм. Гликол кислотанинг ИҚ-спектри.



40-Расм. Реакция маҳсулотининг ИҚ-спектри.

Реакция маҳсулотининг ИҚ-спектрида гликол кислотанинг $\text{C}=\text{O}$ гуруҳига тегишли 1731 см^{-1} -даги полосанинг йўқлиги ва тўртламчи азот

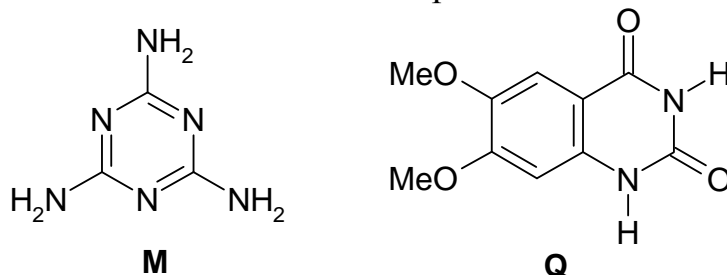
атомининг борлигидан далолат берувчи (2617 см^{-1}) ҳамда карбоксил ионига (COO^-) тегишли полосаларнинг ($1325, 1596\text{ см}^{-1}$) кузатилиши қуйидаги реакция маҳсулоти ҳосил бўлганлигини кўрсатади:



NH_3^+ гуруҳига тегишли деформацион тебраниш натижасида юзага келган полосалар 1660 ва 1542 см^{-1} частоталарда кузатилади.

Иккита органик бирикма қатнашган комплексларни олиш ва уларнинг тузилишини ўрганиш муҳим аҳамиятга эга. Чунки, бундай комплексларда дастлабки бирикмаларнинг физик-кимёвий хусусиятлари ($t_{\text{суюқ.}}$, $t_{\text{қайн.}}$, қовушқоқлиги ва б.) бирмунча ўзгаради.

Бунга мисол қилиб Ҳиндистонлик Баппадитя Рой ва бошқа олимлар томонидан (*Bappaditya Roy, Abhijit Saha, Aluri Esterrani and Arun K. Nandi Soft Matter, 2010, 6, P.3337-3345*) меламина (2,4,6-триамино-1,3,5-триазин) ва 6,7-диметокси- [1Н, 3Н]-хиназолин-2,4-дионларнинг комплексларини олишга бағишланган ишнинг тегишли қисмини келтиришни лозим топдик.

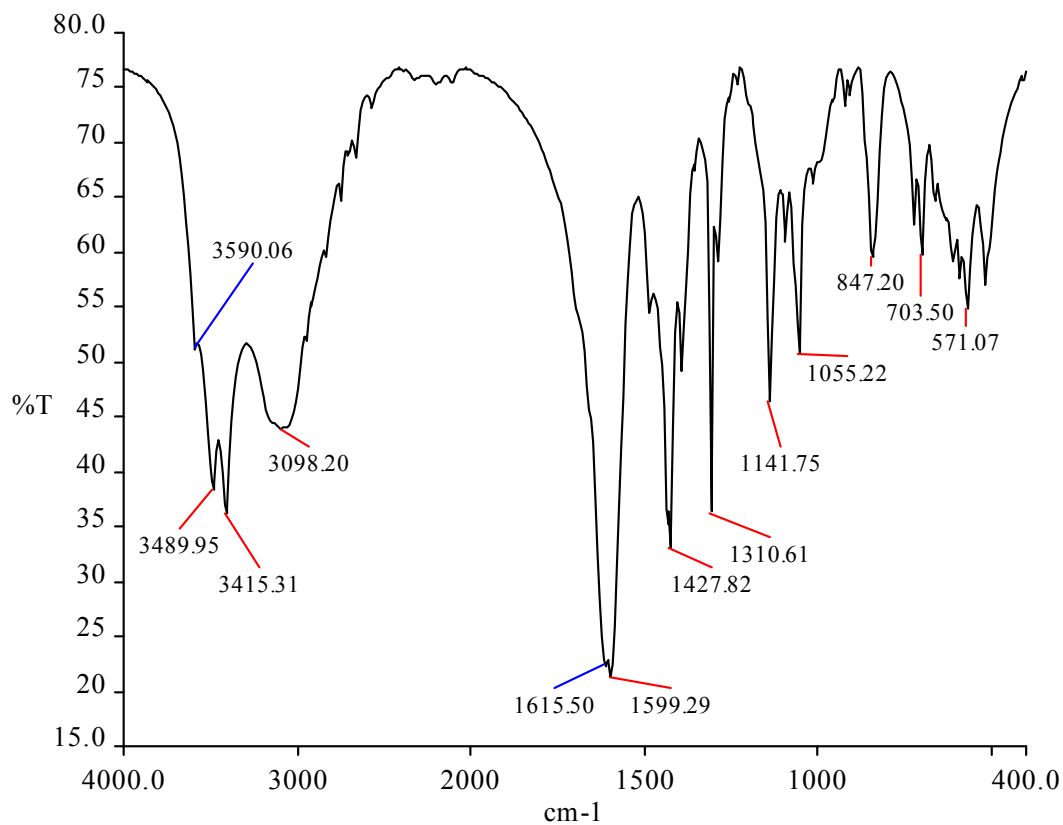


Улар меламина (**M**) ва 6,7-диметокси- [1Н, 3Н]-хиназолин-2,4-дионларни (**Q**) 1:1, 2:1, 3:1, 1:2 ва 1:3 нисбатларда ўрганишган.

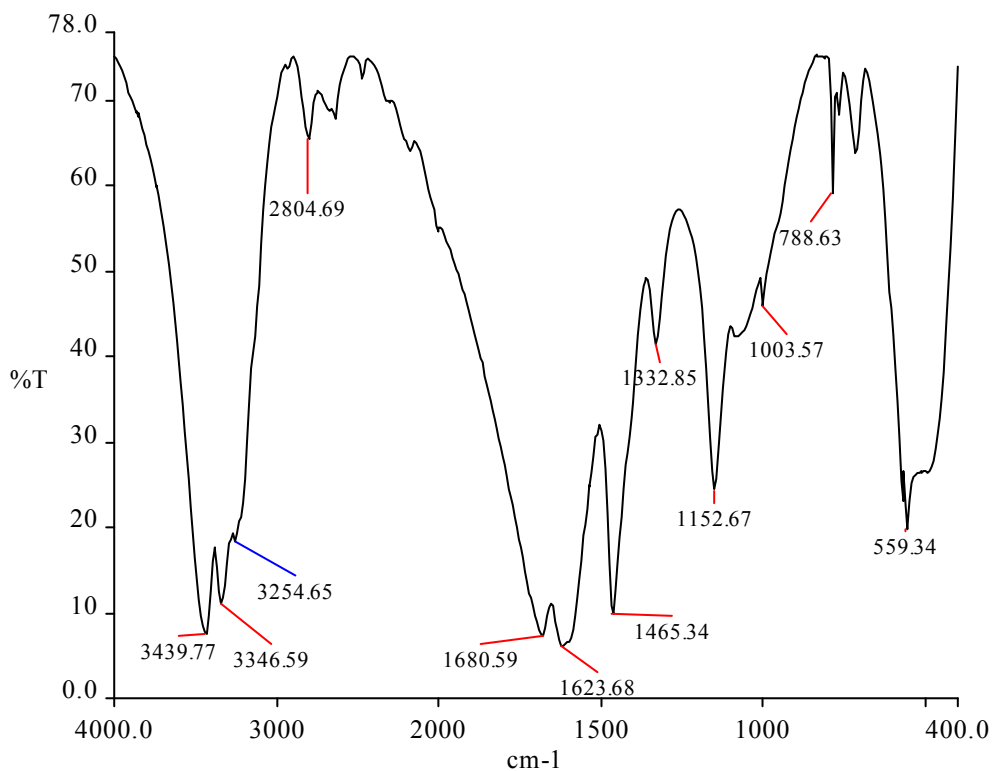
ИҚ-, ультрабинафша (УБ), флуоресценция спектроскопия усулларини ҳамда кутбланган нурларнинг оптик микроскоп ва флуоресцент микроскоп усулларини, шунингдек, калориметрик усулларни қўллаган ҳолда **MQ** 1:1 нисбатда кучли комплекс бирикма ҳосил қилишини мукаммал ўрганишган. Шунини таъкидлаб ўтиш керакки, **MQ** 1:1 бўлган ҳолатда, хиназолин-2,4-дион $\text{C}=\text{O}$ гуруҳларининг валент тебранишларига тегишли полоса, бошланғич ҳолатга нисбатан (1707 см^{-1}) юқори частотага (1713 см^{-1}) силжиган. Демак, ИҚ-спектрларнинг қўшбоғ қисмидаги 5 см^{-1} ўзгариш ҳам комплекс бирикма ҳосил бўлганлигидан далолат бериши мумкин экан.

Худди шундай ўзгариш, Тошкент ирригация ва мелиорация институти «Физика ва кимё» кафедраси собиқ мудири к.ф.д. **З.Каримов** томонидан тақдим қилинган карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ), мочевина-формальдегидли смола (МФС) ва улар асосида олинган **КМЦ:МФС** комплекс бирикмасининг ИҚ-спектрларида ҳам кузатилади.

КМЦ ИҚ-спектрининг $3000\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ соҳасида водород боғланишда қатнашмаётган гидроксил гуруҳларининг валент тебранишлари натижасида юзага келган учта ютилиш полосалари ($3590, 3489$ ва 3415 см^{-1}) кузатилади.



41-Расм. Карбоксиметилцеллюлозанинг (КМЦ) ИҚ-спектри.

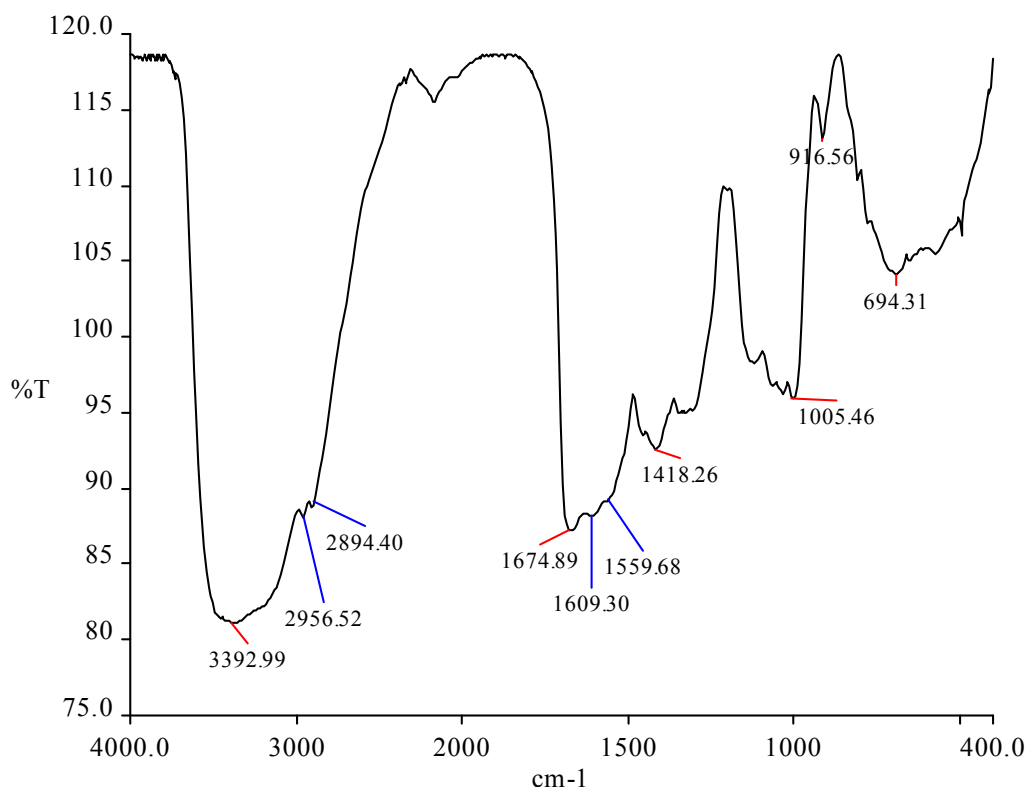


42-Расм. Мочевина-формальдегидли смоланинг (МФС) ИҚ-спектри.

Ундан ташқари водород боғланишда қатнашаётган гидроксил гуруҳларининг валент тебранишларига тегишли, нисбатан кенг полоса 3098 см^{-1} да кузатилади.

КМЦ ИҚ-спектрининг кўшбоғ соҳасида иккита: 1615 ва 1600 см^{-1} –да ютилиш полосалари кўринади.

МФС нинг ИҚ-спектрида амина гуруҳнинг валент тебранишларига тегишли полосалар 3439 , 3346 и 3254 см^{-1} частоталарда кузатилади. Кўшбоғ қисмида эса 1680 ва 1623 см^{-1} ларда жойлашган иккита ютилиш полосаси бор.



43-Расм. КМЦ:МФС комплекс бирикманинг ИҚ-спектри.

КМЦ:МФС ИҚ-спектри бошланғич моддалар спектридан кескин фарқ қилади, яъни **КМЦ** ва **МФС** –нинг $3200-3600\text{ см}^{-1}$ соҳасида кўринган учта полосалар кўшилиб кетган ва уларнинг ўрнида бир мунча кенг полоса 3393 см^{-1} -да пайдо бўлган. Бундан ташқари, **КМЦ** нинг ИҚ-спектридаги 3098 см^{-1} -даги полоса йўқолган.

КМЦ:МФС –нинг кўшбоғ қисмида **КМЦ** ва **МФС** –нинг айна шу қисмидаги ютилиш соҳаларига мос келмайдиган полосалар кузатилади, яъни 1674 , 1609 ва 1559 см^{-1} –даги ютилиш полосалари бошланғич моддаларнинг ҳеч бирида йўқ:

КМЦ	$1615, 1600\text{ см}^{-1}$
МФС	$1680, 1623\text{ см}^{-1}$
КМЦ:МФС	$1674, 1609, 1559\text{ см}^{-1}$

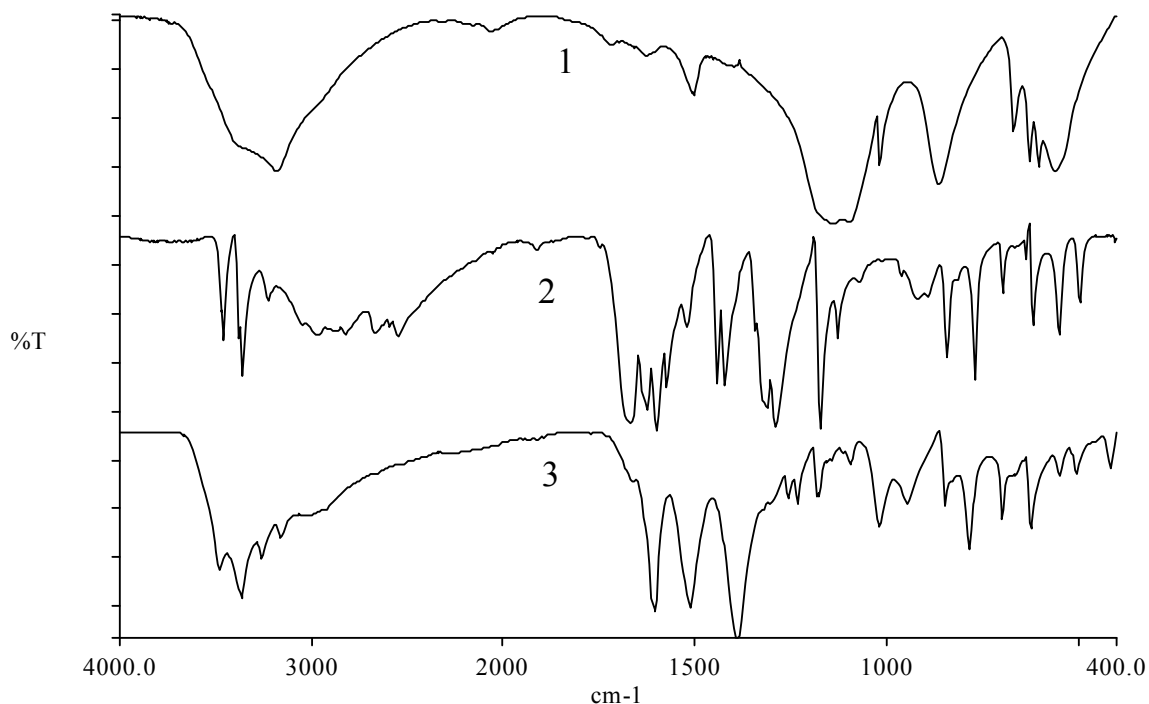
КМЦ:МФС –нинг кўшбоғ қисмидаги ютилиш полосалари **МФС** –га нисбатан спектрнинг қуйи частотали томонига қараб $5-6 \text{ см}^{-1}$ -га силжиган.

Юқоридаги таҳлил натижалари **МФС** $\text{C}=\text{O}$ гуруҳининг **КМЦ** OH гуруҳлари билан ҳамда ўз навбатида **КМЦ** $\text{C}=\text{O}$ (ёки OH) гуруҳларининг **МФС** $\text{N}-\text{H}$ гуруҳлари билан водород боғланишли бирикмалар ҳосил қилиши мумкинлигидан далолат беради.

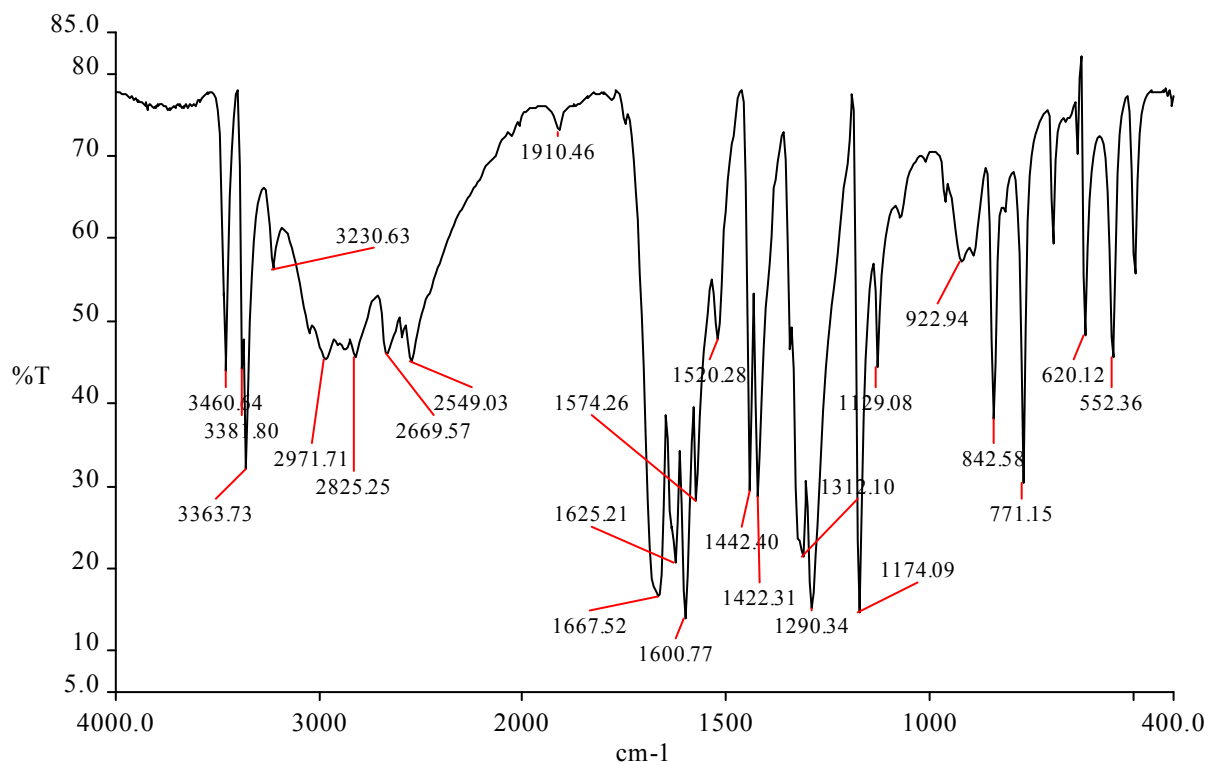
Демак, бошланғич моддалардаги эркин гидроксил гуруҳига тегишли соҳаларнинг охириги маҳсулотда кузатилмаслиги ҳамда кўшбоғ қисмидаги ютилиш полосаларининг $5-6 \text{ см}^{-1}$ қуйи частотали томонга силжишига қараб, **КМЦ:МФС** комплекс бирикма ҳосил бўлган бўлиши мумкин деган хулосага келиш мумкин. Лекин, буни тасдиқлаш учун **КМЦ** ва **МФС** аралашмаларининг ҳам ИҚ-спектрини олиб **КМЦ:МФС** комплекс бирикма спектри билан солиштириш, ундан ташқари, бошқа физик-кимёвий усуллар билан тасдиқлаш мақсадга мувофиқдир.

Металлорганик бирикмаларни, уларнинг комплексларини олиш ва ўрганиш ҳамиша долзарб вазифа саналган. Шу ўринда, Ўз ФА Биоорганик кимё институтининг илмий ходими, кимё фанлари номзоди Ашуров Жамшид томонидан тақдим қилинган, рентген тузилиш таҳлили (РТТ) ёрдамида структураси ўрганилган модданинг ИҚ-спектрларини ўргандик.

Дастлабки моддалар сифатида *пара*-аминобензой кислота ва кобальт хлориднинг кристаллгидрати олинган. Таққосланган спектрдан (44-расм) реакция маҳсулоти спектрининг дастлабки моддалар спектридан фарк қилиши кўриниб турибди.

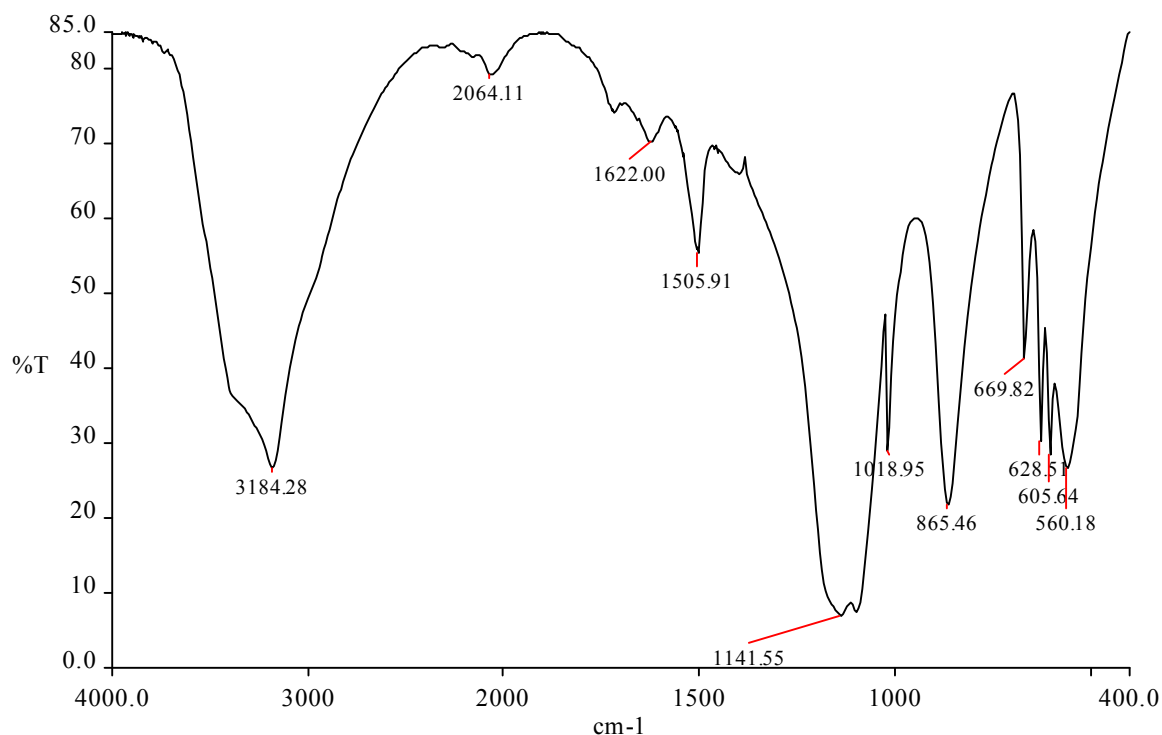


44-Расм. Дастлабки моддаларнинг (1, 2) ва реакция маҳсулотининг (3) ИҚ-спектрлари.



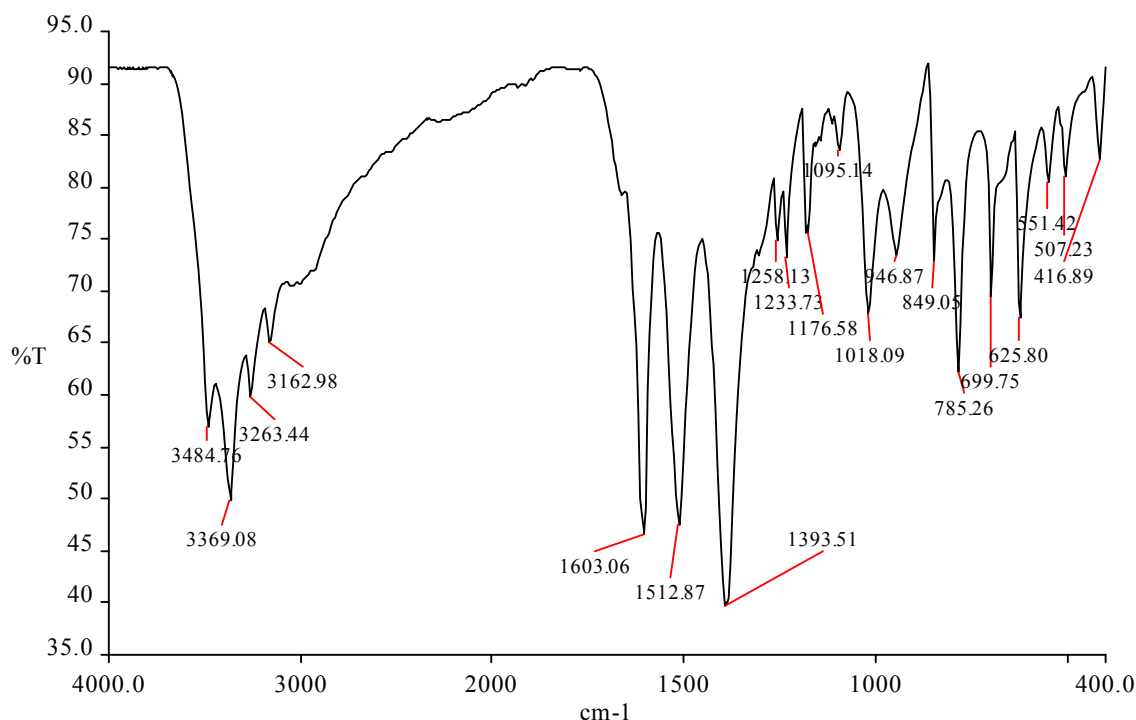
45-Расм. *Пара*-аминобензой кислота ИҚ-спектри.

Пара-аминобензой кислота ИҚ-спектрида карбон кислота димерларига хос полосалар ($2500-2700\text{ см}^{-1}$) мавжуд. Спектрнинг $3200-3500\text{ см}^{-1}$ соҳасида амино гуруҳнинг валент тебранишига тегишли полосалар жойлашган (45-расм). $1500-1700\text{ см}^{-1}$ соҳадаги полосалар мос равишда $\text{C}=\text{O}$ (1667 см^{-1}), NH_2 (1625 см^{-1}) гуруҳларига ва ароматик халқа ($1520, 1574, 1600\text{ см}^{-1}$) тебранишларига тегишли.



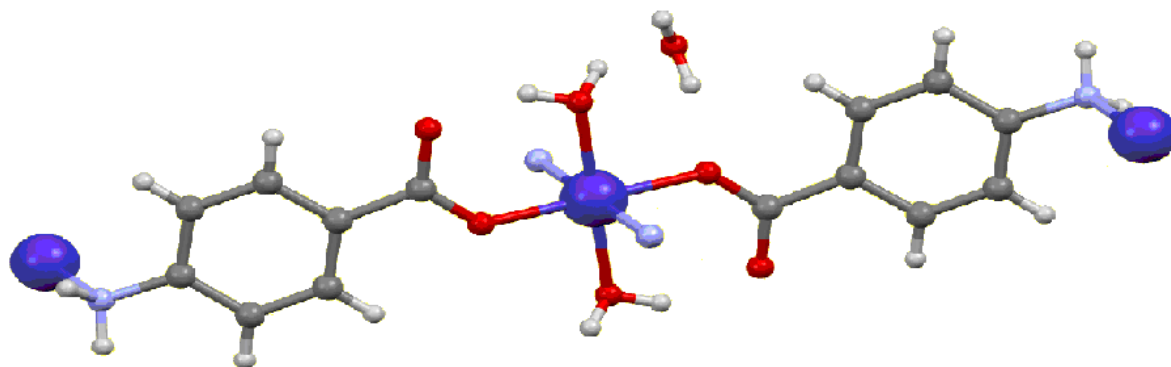
46-Расм. $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ИҚ-спектри.

CoCl₂ · 2H₂O ИҚ-спектрида: 3184, 1622, 1505 см⁻¹ (H₂O), 1142, 1018, 865, 669 см⁻¹ (Co-OH₂),



47-Расм. Реакция махсулотининг ИҚ-спектри.

Реакция махсулоти спектрининг 3100-3500 см⁻¹ соҳадаги полосалар амина гуруҳи ва сув молекуласига тегишли. 1603 см⁻¹ даги полоса амина гуруҳининг деформацион тебраниши натижасида юзага келган. 1512 ва 1393 см⁻¹ -даги полосалар карбоксил ионинг мавжудлигидан далолат беради. Фақат ИҚ-усули асосида РТТ усулида аниқланган структурани тасаввур қилиш анча мураккаб:



Фойдаланилган адабиётлар

1. Беллами Л. Инфракрасные спектры молекул. Москва, изд-во «Иностран. Лит.», 1957, 444 с.
2. Применение спектроскопии в химии. Под ред. В. Вест, Москва, изд-во «Иностран. Лит.», 1959, 659 с.
3. Кесслер И. Методы инфракрасной спектроскопии в химическом анализе, М. Мир 1964, 287 с.
4. Наканиси А. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. Москва, изд-во «Мир», 1965, 220 с.
5. Тарасов К.И. Спектральные приборы. Изд-во «Машиностроение», 1968, 389 с.
6. Беллами Л. Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул, М. Мир 1971, 318 с.
7. Белл Р. Дж., Введение в Фурье-спектроскопию, М., Мир, 1975, 382 с.
8. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и Масс-спектроскопии в органической химии. Москва, изд-во «Моск ун-та», 1979, 240 с.
9. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. Москва, изд-во «Мир», 1982, 328с.
10. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М., Спектроскопия органических веществ, 1992. 305 с.
11. Тонков М.В., Фурье-спектроскопия – максимум информации за минимум времени. 2001. 6 с.
12. Преч Э. и др., Определение строения органических соединений (табл. спектральных данных) 2006. 441 с.
13. www.scheltec.ru
14. HyperChem 8.0 Program Package, trial version, www.hyper.com
15. www.Ziyonet.uz