

**Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги**

**Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети**

**Хаитбаев А.Х., Маулянов С.А., Тошов Х.С.**

**Органик бирикмаларни  
УБ- ва ИҚ-спектр  
усуллари ёрдамида таҳлил қилиш**

**Тошкент-2020**

УДК 543.421/424

**Хаитбаев А.Х., Маулянов С.А., Тошов Х.С.**

**Органик бирикмаларни УБ- ва ИҚ-спектр усуллари ёрдамида таҳлил қилиш: Услубий қўлланма / Ўзбекистон Миллий университети, Тошкент, 2020. 81 б.**

Услубий қўлланма 5140500 – Кимё таълим йўналиши, 5141800-Табиий ва физиологик фаол бирикмалар кимёси бакалаври таълим йўналишлари талабалари ҳамда 5А140501-Кимё (*фан йўналишлари бўйича*), 5А320102-Янги материалларнинг микроскопик хусусиятларини ҳисоблаш ва компьютерда моделлаштириш, 5А140505-Радиокимё мутахассисликлари фанлари дастури ва Малака талаблари мазмунига мос равишда ёзилди.

Қўлланмада ҳар бир усулни қўлланилиш соҳалари, уларнинг афзалликлари ва камчиликлари, чекланишлари, ривожланиш истиқболлари ва бошқа хусусиятлари кўрсатиб берилди. Услубий қўлланма талабаларда органик бирикмаларнинг электрон ва тебранишли спектрларини таҳлил қилиш кўникмаларини шакллантиришга ёрдам беради.

Ҳар бир бўлим сўнггида назорат саволлари ва масалалар келтирилган. Ушбу услубий қўлланма кимё, биология, физика ва бошқа йўналиш талабалари, докторантлар, илмий ходимлар ҳамда барча қизиқувчилар учун мўлжалланган.

Услубий қўлланма Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети Кенгаши тамонидан нашрга тавсия этилган (2019 йил 25 декабр, баённома №\_\_).

### **Тақризчилар:**

**Маҳкамов М.А.** – ЎзМУ полимерлар кимёси кафедраси профессори в.б., кимё фанлари доктори

**Холиков Т.С.** – ЎзМУ “Органик кимё” кафедраси мудири, кимё фанлари номзоди.

**Хаитбаев Алишер Хамидович**

**Маулянов Салихжан Алимжанович**

**Тошов Хамза Сайидмуродович**

## КИРИШ

Сўнгги йилларда органик бирикмалар таркибини таҳлил қилиш усулларида муҳим ўзгаришлар рўй берди, бундай ўзгаришлардан бири соҳага инструментал усулларни жорий этилиши ҳисобланади. Бунинг натижасида функционал таҳлил усуллари ёрдамида ишончлироқ натижалар олиш имконияти ортиди, чунки бундай таҳлил натижаларини олиш учун кам вақт ва меҳнат сарфлана бошлади.

Мазкур қўлланманинг муҳим вазифаларидан бири органик бирикмаларни идентификация қилишнинг асосий қоидаларини кўриб чиқиш ҳисобланади. Талаба ва изланувчилар тадқиқот характериға эға бўлган лаборатория ишларини бажаришда, курс иши ва битирув малакавий ишларини бажаришида, табиий объектлардан ажратиб олинган бирикмаларни ёки бу объектларни модификациялаш билан синтез қилинган бирикмаларнинг тузилишини далиллар билан исботлаб бериши керак бўлади.

Электрон спектрларнинг спектрал параметрларидаги ўзгаришларни кузатиш органик бирикмаларнинг тузилишидаги ўзгаришларни аниқлаш имконини беради, бу органик бирикмалар молекулаларидаги атомларнинг ўзаро таъсирини аниқлаш электрон назарияси асосида органик бирикмалар хоссаларини башорат қилишда жуда муҳим ҳисобланади.

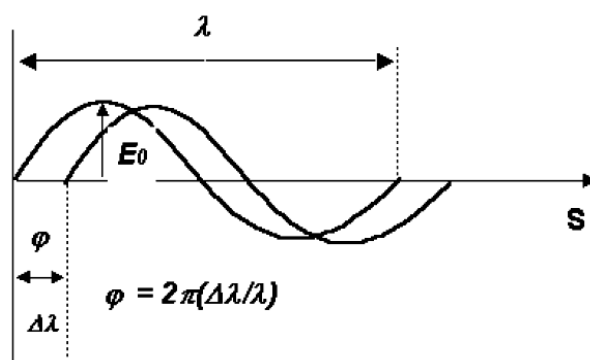
## АСОСИЙ СПЕКТРОСКОПИК ТАҲЛИЛ УСУЛЛАРИ

Кўринувчан ёруғлик нури, радиотўлқинлар, юмшоқ инфрақизил (иссиқлик) ва қаттиқ рентген нурланишлар,  $\gamma$ -нурлар – буларнинг барчаси электромагнит тўлқинларга киради. Электромагнит тўлқин – бу электромагнит майдоннинг фазода тарқалиш жараёни бўлиб, тўлқин тарқалиш нурига перпендикуляр йўналган электр ва магнит майдонларининг кучланиш векторларини кетма-кет ва ўзаро боғлиқ ҳолда ўзгариши ҳисобланади, бунда электр майдонининг ўзгариши магнит майдонини ўзгаришига олиб келади, у ўз навбатида электр майдоннинг ўзгаришига сабаб бўлади.

Электр майдоннинг кучланиши ( $E$ ) – майдоннинг берилган нуқтасида жойлашган ҳаракатсиз зарядга таъсир этувчи кучнинг шу заряд қиймати нисбатига айтилади.

Магнит майдон кучланиши ( $H$ ) - магнит индукцияси векторининг фарқи бўлиб, майдонни зарядланган заррачаларга таъсир этиш характеристикаси, ҳамда физик жисмнинг магнитланган ҳолатини характерловчи вектор катталиқ ҳисобланади.

Электромагнит оқимнинг кванти (фотон) электр оқим квантидан ва магнит оқим квантларидан ташкил топган бўлиб, у ўзгарувчан электр ва магнит майдонларнинг ўзаро таъсирлашувидан пайдо бўладиган бир бутун электромагнит майдонининг юзага келишидан пайдо бўлади. Исталган электромагнит тўлқин тўртта параметр билан характерланади: йўналиш, тўлқин узунлиги ( $\lambda$ ), амплитуда ва бошланғич фаза ( $\varphi$ ) (1-расм). Электромагнит тўлқинни у ёки бу нурланишларга нисбати ( $\gamma$ -нурлар, УБ-нурланиш, кўринувчан ёруғлик нури, инфрақизил нурланиш, радиотўлқинлар ва б.) тўлқин узунлиги  $\lambda$  билан аниқланади.



1-расм. Электромагнит тўлқиннинг асосий параметрлари

Қуйидаги 1-жадвалда электромагнит нурланиш спектр усуллари юзасидан айрим маълумотлар келтирилган.

**1-жадвал**

*Электромагнит нурланиш спектрлари*

$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{см}$	Соҳа	Энергетик ҳолатлардаги ўзгаришлар
$10^{-3}$	$10^3$	Радиоспектроскопия	Ядро ва электронларнинг спинлари Кристалл панжарадаги атомлари
$10^3$	$10^{-3}$	ИҚ - спектроскопия	Тебранишлар туфайли молекула-лардаги атомлар
$10^5$	$10^5$	Кўринувчан соҳадаги спектроскопия	Валент электронлар
$10^6$	$10^{-6}$	УБ - спектроскопия	
$10^6-10^7$	$10^{-6}-10^{-7}$	Масс - спектроскопия	Ионларни ҳосил бўлиши ва боғларнинг узилиши
$10^9$	$10^{-9}$	Рентгеноструктур анализ	Валент қобиқларнинг электронлари
$10^{10}$	$10^{-10}$	$\gamma$ - нурланиш таъсирида борадиган ядро реакциялари	Ядро

Кенг ишлатиладиган спектроскопия усуллари иккита гуруҳга бўлиш мумкин. Биринчи гуруҳга оптик атом спектроскопия усуллари кириб, уларнинг барчаси эркин атом валент электронлари энергиясининг ўзгаришига асосланган. Иккинчи гуруҳ усуллари спектрнинг рентген соҳасида жойлашган юқори энергияли нурланишлар таъсирида ички қобиқларнинг электронларини кўзгалган ҳолатга ўтишига асосланган. Қуйидаги 2-жадвалда ана шу икки гуруҳ спектроскопия усуллари келтирилган.

**2-жадвал**

*Спектроскопия усуллари*

Анализ усуллари	Спектр диапазони	Жараён	Усули	
			Атомлаштириш	Кўзгатиш
Атом-эмиссионли (АЭС)	Оптик	Фотонлар эмиссияси	Юқори ҳароратда	Юқори ҳароратда
Атом-флуоресцентли (АФС)	Оптик	Фотонлар эмиссияси	Юқори ҳароратда	УБ-кўринувчан нурланиши
Атом-абсорбцион (ААС)	Оптик	Фотонлар абсорбцияси	Юқори ҳароратда	Талаб қилинмайди
Рентген-эмиссион (РЭА)	Рентгенли	Фотонлар эмиссияси	Талаб қилинмайди	Электронлар оқими
Рентген-флуоресцент (РФЛА)	Рентгенли	Фотонлар эмиссияси	Талаб қилинмайди	Рентген нурланиш
Рентген-абсорбцион (РАА)	Рентгенли	Фотонлар абсорбцияси	Талаб қилинмайди	Талаб қилинмайди

Рентген- фотоэлектрик (РФЭС)	Электронларнинг кинетик энергияси 1500 эВ гача бўлган	Электронлар эмиссияси	Талаб қилинмайди	Электромагнит нурланиш (рентген)
Оже- электронли(ОЭС)	электрон спектрларни қайд этиш	Электронлар эмиссияси	Талаб қилинмайди	Электронлар оқими

Ютилиш ва нурланиш частотаси ўртасидаги нисбат кўпинча кимёвий бирикмаларнинг характеристикаси бўлиб хизмат қилади.

Параметрлар ўртасидаги боғлиқликлар:

- Тўлқин сони ( $см^{-1}$ ):

$$\nu = 1/\lambda,$$

Бунда  $\nu$  – частота, Гц;  $\lambda$  – тўлқин узунлиги;

- бир моль фотонлар энергияси:

$$E = N_a h \nu,$$

Бунда  $E$  – энергия, кДж/моль;  $N_a$  – Авогадро сони;  $h$  – Планк доимийси ( $6,26 \times 10^{-34}$  Дж/моль);  $\nu$  – частота, Гц.

Моддалар электромагнит нурланишни танлаб ютади: баъзи бир тўлқин узунликларида нур ютилиш жараёни интенсив кечса, баъзида эса аксинча ёруғлик умуман ютилмайди. Энергиялари ( $h$ ), заррачаларнинг қўзғалган ҳолатга ўтиш энергиясига тенг бўлган ёруғлик квантлари интенсив равишда ютилади.

Ютиладиган энергияларни тўлқин узунликлари бўйлаб график тасвирланиши ютилиш спектрлари дейилади. Координаталар ўқига қўйиладиган катталикларга қараб спектрларни тасвирлаш усуллари турлича бўлиши мумкин. Ёруғлик энергиясининг ютилган миқдори  $T$ ,  $A$ ,  $\epsilon$  катталиклар ёрдамида ифодаланади. У ёки бу катталиқни танлаш спектр соҳасига, ютилиш катталигига, тадқиқот олдида турган вазифаларга боғлиқ бўлади. Спектрнинг кўринувчан УБ-соҳаларида одатда  $A = f(\epsilon)$  ёки  $\lg A = f(\epsilon)$  координаталаридан фойдаланилади, ИҚ-спектроскопияда спектрлар  $T = f(\nu)$  координаталарда берилади.

**Спектрнинг асосий характеристикалари.** Тўлқин узунлиги қиймати билан ютилиш интенсивлиги ўртасидаги боғланишни ифодаловчи эгри чизиқ ютилишнинг спектрал чизиғи дейилади. Спектрнинг куйидаги характеристикалари таҳлил учун энг катта аҳамиятга эга:

- максимумлар сони (ютилиш чизиқлари);
- тўлқин узунлиги шкаласида ютилиш чизиқларининг жойлашиши;
- максимум баландлиги (ютилиш максимумида моляр коэффициент қиймати);

- ютилиш чизиғи интенсивлиги, чизикларнинг кенглиги ва шакли.

Ютилиш чизиғининг кенглигини  $\delta$  – ютилиш чизиғининг яримкенглиги билан ифодалаш қабул қилинган;  $\gamma = \epsilon/2$  тах да ўлчанади.

**Ютилиш спектрларининг турлари.** Молекуляр абсорбцион спектроскопия нурланиш ютилаётган вақтда молекулаларнинг энергетик ҳолатларини ўзгариши кузатилади. Молекулаларнинг ҳаракатланиш турларидан қуйидагиларни кўрсатиш мумкин:

- Заррачанинг бир бутун каби ҳаракатланиши;
- Ядроларнинг тебраниши;
- Электронларни кўзғалган ҳолатга ўтиши.

Инфрақизил спектроскопия усулида айланма ва тебранма ўтишларга асосланган спектрларни кузатиш мумкин, улардан аналитик кимёда молекулаларнинг тузилишини ўрганишда фойдаланилади. Мумкин бўлган тебранишларнинг миқдори молекуладаги атомларнинг сонига боғлиқ бўлади, кузатиладиган тебранишларнинг сони молекулаларнинг симметриясига боғлиқ.

Ютилиш интенсивлиги ютилиш максимумидаги  $\epsilon$  – тах моляр коэффициент қийматини ақс эттиради. Тебранма спектрнинг юқори энергетик чегараси сифатида одатда 60 кДж/моль га тенг бўлган фотонлар энергияси олинади. Нурланиш энергиясининг янада ортиб бориши (кўринувчан ва ультрабинафша) электронларни кўзғалишига сабаб бўлади ва спектрда молекулалардаги энергетик поғоналар ўртасида электронларнинг ўтишига мос келадиган чизикларни пайдо бўлишига олиб келади.

### **Назорат саволлари**

(жавобни асослаган ҳолда)

1. УБ-спектроскопияда энергетик ҳолатдаги ўзгаришлар ..... боғлиқ.
2. ....электромагнит тўлқин қуйидаги параметрлар билан характерланади
3. Айланма ва тебранма ўтишлар, спектрнинг ..... соҳасида кузатилади.
4. Энергиялари ..... тенг бўлган ёруғлик квантлари интенсив ютилади.
5. Ютилиш спектри деб ...
6. Атом-эмиссион таҳлилларда атомлаштириш ..... да содир бўлади.
7. Боғларнинг узилиши ва ионлаштириш ..... спектроскопия учун хос.
8. ...формула тўлқин сони ва тўлқин узунлиги ўртасидаги боғлиқликни белгилайди.
9. Иккинчи гуруҳ усуллари .....электронларни юқорироқ энергияли нурланиш таъсирида кўзғалишига асосланган, у спектрнинг рентген соҳасида жойлашган.

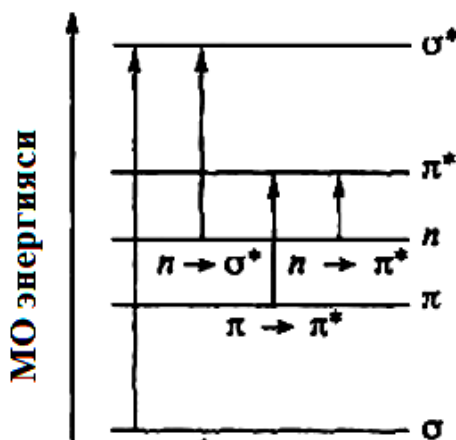
## УБ-СПЕКТРОСКОПИЯ

Электрон (УБ), инфрақизил (ИК), масс спектрометрия ҳамда ядро магнит резонанс (ПМР,  $C^{13}$  ва б.) усуллари турли соҳаларда модда тузилишини аниқлаш учун қўлланилади.

УБ-спектроскопия усулининг физик асослари бўлиб молекулаларнинг электрон ҳолатлари ва молекулалардаги электрон ўтишларнинг синфланиши ҳисобланади.

Электрон спектроскопия молекулаларнинг энергетик поғонари ўртасида борадиган ўтишларни ўрганади. Бунда поғоналар ўртасидаги энергетик фарқ электромагнит нурланишлар спектрлардаги кўринувчан ва УБ-соҳаларидаги нурланишларга мос келади.

Электрон спектроскопия ўз ичига тўлқин узунлиги интервали 200–900 нм бўлган соҳани қамраб олади. Нур ютишнинг мазкур соҳасида текширилаётган модда молекуласи маълум миқдорда энергия ютиб олса, электрон тўлган орбиталдан бўш ёки қисман тўлган орбиталга ўтиши мумкин. Орбиталларнинг энергиялари квантланган бўлгани учун, ҳар бир ўтишга энергиянинг маълум миқдори мос келади ( $\Delta E$ ). 2-расмда энергетик поғоналарнинг жойлашиш схемаси, органик молекулаларда электрон ўтишларнинг турлари кўрсатилган.



2-расм. Органик молекулаларда энергетик поғоналарнинг жойлашиш схемаси ва электрон ўтиш турлари

Электромагнит спектрнинг ультрабинафша соҳасида энергия ютилган вақтда  $\sigma$ - ёки  $\pi$ -орбиталларни боғловчи, ҳамда бўшаштирувчи орбиталларидаги ( $n$ -) электронлар турли бўшаштирувчи орбиталларга ўтиши мумкин.  $n \rightarrow \pi^*$ ,  $\pi \rightarrow \pi^*$  ва  $n \rightarrow \sigma^*$  ўтишлар бунга мисол бўлади. Электрон ўтишида биринчи ҳарф асосий ҳолатни, иккинчиси эса кўзғалган ҳолатни билдиради.  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  ўтиш учун юқоридаги ҳолатларга қараганда кўпроқ энергия керак бўлади, бундай ўтишни фақат вакуумли ультрабинафшанинг қисқа тўлқиндаги соҳасида кузатиш мумкин.

Электрон спектрлар кенг чизиклардан ташкил топган бўлиб, ютилган ёруғликнинг тўлқин узунлиги ( $\lambda$ , нм) оптик зичлик ёки моляр экстинция коэффициентига ( $\epsilon$ , л/моль·см) боғлиқдир. Электрон спектрлардаги ютилиш қийматлари Ламберт-Бер қонунидан топиладиган моляр экстинция коэффициентига ( $\epsilon$ ) боғлиқ бўлган характеристик интенсивликка эга:

$$\epsilon_{\max} = A_{\max} / (c \cdot l),$$

бунда  $\epsilon_{\max}$  – ютилиш коэффициенти;  $A_{\max}$  – оптик зичлик;  $c$  – концентрация моль/л;  $l$  – кювета қалинлиги, см.

Ютилишнинг моляр коэффициенти ( $\epsilon$ ) - бу 1 см қалинликка эга бўлган кюветага солинган текширилаётган модданинг бир моляр эритмасининг оптик зичлиги.

Оптик зичлик ўз навбатида қуйидаги формула билан аниқланади:

$$A = -\lg I/I_0 = \epsilon \cdot c \cdot l,$$

Бу ерда  $I$  –кюветадаги модда эритмасидан ўтган нурнинг интенсивлиги,  $I_0$  эса тушаётган бошланғич нурланиш интенсивлиги. Хатонинг қийматини камайтириш учун оптик зичлик ўлчанаётган вақтда эритманинг концентрацияси ва қатлам қалинлиги шундай танланадики, ўрганилаётган спектрал соҳадаги оптик зичлик 0,2-0,7 бўлган ораликда жойлашган бўлиши керак.

Кўпчилик ҳолатларда бундай мақсадга эришиш учун 0,01 дан 0,00001% гача концентрацияли эритмалардан фойдаланган вақтда эришилади (кювета қалинлиги 10 мм). Эритувчиларни танлаган вақтда уларнинг ютилиш соҳасини эътиборга олиш шарт (3 жадвал).

### 3-жадвал

*УБ-спектроскопияда энг кўп ишлатиладиган эритувчиларнинг ютилиш соҳалари*

№	Эритувчи	Ютилиш соҳаси, нм
1	Ацетонитрил	190
2	Сув	191
3	Циклогексан	195
4	Гексан	195
5	Метанол	201
6	Этанол	204
7	Диэтил эфири	215
8	Метилен хлориди	220
9	Хлороформ	237
10	Углерод тўрт хлориди	257

Электрон спектроскопияда текшириладиган модда эритмалари томонидан ютиладиган нурланишнинг турига қараб электрон спектроскопияни кўпинча

ультрабинафша ва кўринувчан соҳадаги спектроскопия деб аташади. Инсон кўзи фақат тўлқин узунлиги 400 дан 80 нм гача бўлган “кўринувчан” қисминигина илғай олади. 200-400 нм тўлқин узунлигидаги нурланишни “яқин ультрабинафша соҳа” деб аталади. 200 нм гача бўлган спектр соҳасини ўрганиш учун вакуумли қурилмалардан фойдаланиш лозим (узоқ ультрабинафша соҳа).

Қуйида келтирилган 4-жадвалда ютилган нурнинг тўлқин узунлиги ва кузатиладиган эритма ранги берилган.

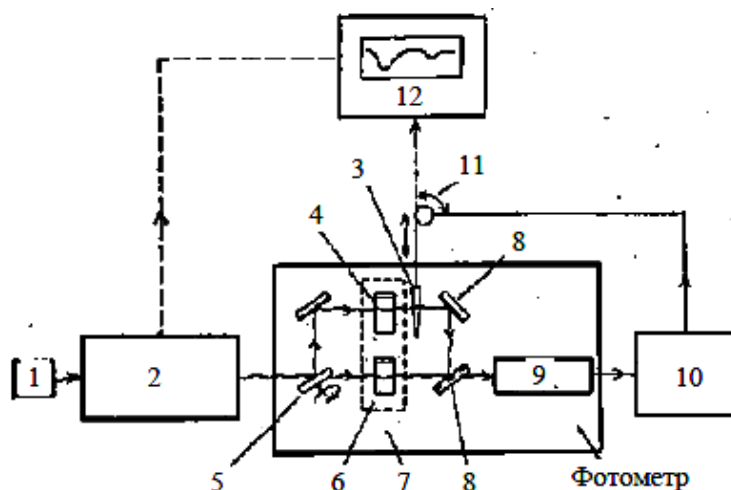
#### 4-жадвал

*Ютилган нурнинг тўлқин узунлиги ва кузатилаётган ранг*

№	Ютилган нурнинг тўлқин узунлиги $\lambda$ , нм Кузатилаётган ранг	Ютилаётган ранг
1	400–535. Яшил-сарик	Бинафша
2	435–480. Сарик	Кўк
3	480–490. Сарғиш	Яшил-кўкиш
4	490–500. Қизил	Кўкиш-яшил
5	500–560. Қизғиш бинафша	Яшил
6	560–580. Бинафша	Сарик-яшил
7	580–595. Кўк	Сарик
8	595–605. Яшил-кўк	Сарғиш
9	605–730. Кўкиш - яшил	Қизил
10	730–760. Яшил	Тўқ қизил

#### **УБ-спектрофотометрнинг ишлаш принципи**

Замонавий икки нурли спектрофотометрлар ютилишни махсус қурилмалар ёрдамида бевосита ёзиб бориш имконини беради. Ютилиш спектрлари ординатада ютилиш ( $A$ ) (ёки  $\epsilon$ ., ёки  $\lg \epsilon$ .), абсциссада эса – тўлқин узунлиги ( $\lambda$ ) қийматлари келтирилган график ёрдамида тасвирланади. Аниқ микдорий анализ ўтказишдан аввал ўрганилаётган ҳолат учун ёруғликни ютилиш қонуни мос келиш ёки келмаслигини ўрганиш керак бўлади. Бунинг учун ютилишни ( $A$ ) бир неча концентрацияларда ( $C$ ), маълум тўлқин узунлигида ва кювета қалинлигида ўлчанади. Агар Бугер-Ламберт-Бер қонуни маълум концентрациялар оралиғида бажарилса,  $u$  ҳолда координаталар бошидан чиқадиган тўғри чизик ҳосил бўлиши керак. Бу қонундан четга чиқиш манфий ёки мусбат четланишлар деб белгиланади. Баъзида қонун битта тўлқин узунлигида ( $\lambda_1$ ) бажарилади, бошқа тўлқин узунлигида ( $\lambda_2$ ) бажарилмайди. 3-расмда УБ- ва кўринувчи соҳада ишлайдиган спектрофотометрнинг тузилиши тасвирланган.



**3-расм. Нолли оптик системага эга бўлган икки нузли автоматик спектрофотометрнинг схемаси:**

1 – нурланиш манбаи; 2 – монохроматор; 3 – аттенюатор; 4 – таққослаш кюветаси; 5 – узгич; 6 – намуна зонаси; 7 – намуна солинган кювета; 8 –кўзгу; 9 – детектор; 10 – кучайтиргич; 11 – сервомотор; 12 – ёзиш қурилмаси

375 нм тўлқин узунлиги соҳасида нурланиш манбаи сифатида вольфрамли қиздириш лампаси ва кичик тўлқин узунликлари учун разрядли дейтерийли лампа хизмат қилади.

Спектр олиш жараёнида ёруғликнинг бошланғич қисми монохроматор (дифракцион панжара ёки кварцли призма) дан ўтиб, айланиб турадиган кўзгули сектор ёрдамида иккита бир хилдаги нурга бўлинади. У навбатма-навбат нурни битта канал (очиқ сектор)га ўтказиб иккинчиси (кўзгули сектор)да акс эттиради. Намуна томонидан нур ютилишини ўлчаш учун намунадан ва таққослаш кюветаларидан ўтган нурларнинг интенсивликлари таққосланади. Узгичдан кейин иккита нур навбатма-навбат детектор (фотоқўпайтиргич)га берилади ва кучайтирилади. Агар олинаётган нур ютилиш қийматлари интенсивликлари бир хил бўлса, кучайтиргичдан кейин чиқиш сигнали кузатилмайди. Интенсивликларда оз бўлса-да фарқ қиладиган ҳолатларда, чиқиш сигнали пайдо бўлади. Бу сигнал кучайтирилади ва аттенюатор (электр кучланишини, ток кучини, электр ёки электромагнит тебранишлар қувватини асталик билан, босқичма-босқич ёки белгиланган тарзда пасайтириб берадиган қурилма)ни ишга туширади, у таққослаш нурига киритилади ёки ундан чиқарилади. Аттенюатор ингичка текис тароққа ўхшаган бўлиб, тишлари орасидаги оралиқ масофа ортгани сари чизиқли равишда масофа ҳам ортади.

Тароқдаги очиқ жойнинг улуши нурни ўтказиш даражасини аниқлайди, уни тор оралиқда чизиқли ўзгартириш мумкин. Сигнал фазасига қараб аттенюатор харакати шундай бошқариладики, намунадан ўтган нурнинг

интенсивлиги, таққослаш нурининг интенсивлигига тенглашиши керак бўлади. Нурларнинг интенсивликлари тенглашганда сигнал бўлмайди, аттенюаторнинг ҳаракати тугайди. Аттенюаторнинг ҳолати намунанинг нисбий ютилиш характеристикаси ҳисобланади: унинг ҳолатини рақамли мосламага узатилиши ютилиш қийматини кўрсатади.

СФ-2000 спектрофотометри– бир нурли спектрофотометр бўлиб, унда УБ-ва кўринувчан каналлар алоҳида ишлайди, бу ўзаро таъсирлашувнинг олдини олади. Фокусировкага таъсир этадиган, спектрал интервални ажралиши ва детекторлашга таъсир киладиган барча элементлар, ҳар бир каналлар учун индивидуал тарзда оптималлаштирилган. Параметрларига кўра СФ-2000 спектрофотометри хорижий шу синф ускуналаридан қолишмайди. Техник характеристикалари: спектрал диапазони 200-1000 нм, ўлчаш диапазони – ўтказиш коэффициентлари -1-125%, оптик зичлиги -0,1-0,2.

Оптик зичликни ўлчашда оптик зичлик 1 га тенг бўлганда фотометрик аниқлик 0,01 га тенг. Спектрофотометрда минимал нур тарқалиш билан нур ўтказиш характеристикаларини олиш учун кварц қопламали оптик элементлар ишлатилади. Оптик нур шундай фокусланганки, кювета бўлинмасида нур фақат кюветанинг пастки қисмидан ўтади, ўлчашларни бажариш учун намуна 1 см баландликда қуйилади, К10 стандарт кювета учун 1 мл намуна етарли бўлади. УБ-нурланиш манбалари учун сифатли Hamamatsu (Япония) дейтерийли лампалари ишлатилади, кўринадиган ёруғлик каналида эса – Philips галоген лампалари ишлатилади, улар тез алмаштирилиши мумкин. Тирқишнинг спектрал кенглиги 1нм, бу исталган спектрни хатоликларсиз қайд этилишини таъминлайди. Хатоликлар тор спектрал чизикларда оптик зичликларни “суркалиб” кетиши билан боғлиқ бўлади. Тирқишнинг спектрал кенглиги катта бўлган асбобларда спектрнинг баъзи бир соҳаларини ўлчаш қийматларнинг бузилишига олиб келиши мумкин.

СФ-2000 спектрофотометрдан қуйидаги ҳолларда фойдаланиш мумкин:

- индивидуал моддалар ва кўп компонентли системалар анализи учун;
- сувдаги ноорганик моддалар миқдорини назорат қилиш учун;
- ишчи зона ҳавосини назорат қилиш учун;
- тупроқ таркибидаги кимёвий моддалар миқдорини назорат қилиш учун;
- озик-овқат маҳсулотларини назорат қилиш учун.

### **Электрон спектрлар ва органик молекулаларнинг тузилиши ўртасидаги боғлиқлик**

$\epsilon$  ва  $\lambda$  характеристик катталиклар билан нур ютилишига маъсул бўлган функционал гуруҳ хромофор дейилади. Агар молекулада битта оддий боғ билан ажратилган иккита хромофор бўлса, бирикманинг спектри индивидуал

хромофорларнинг спектрал характеристикаларининг йиғиндисига узвий боғлиқ бўлади.

Агар иккита хромофор фақат битта оддий боғ билан ажратилган бўлса (туташ системалар) спектрал характеристикалар ўзгаради. Қуйидаги 5-жадвалда органик бирикмалар таркибида учрайдиган айрим хромофор гуруҳларда кузатиладиган ўтиш турлари келтирилган.

### 5-жадвал

*Органик бирикмалар асосий синфларининг хромофорларида электрон ўтиш турлари ва ютилиш максимумлари*

№	Органик бирикмалар синфлари	Кузатиладиган ўтиш тури	$\lambda_{\max}$	$\lg(\epsilon)$
1	Нитриллар	$n \rightarrow \pi^*$	160	<1.0
2	Алкинлар	$\pi \rightarrow \pi^*$	170	3.0
3	Алкенлар	$\pi \rightarrow \pi^*$	175	3.0
4	Спиртлар	$n \rightarrow \sigma^*$	180	2.5
5	Оддий эфирлар	$n \rightarrow \sigma^*$	180	3.5
6	Кетонлар	$\pi \rightarrow \pi^*$	180	3.0
		$n \rightarrow \pi^*$	280	1.5
7	Альдегидлар	$\pi \rightarrow \pi^*$	190	2.0
		$n \rightarrow \pi^*$	290	1.0
8	Аминлар	$n \rightarrow \sigma^*$	190	3.5
9	Кислоталар	$n \rightarrow \pi^*$	205	1.5
10	Мураккаб эфирлар	$n \rightarrow \pi^*$	205	1.5
11	Амидлар	$n \rightarrow \pi^*$	210	1.5
12	Тиоспиртлар	$n \rightarrow \pi^*$	210	3.0
13	Нитробирикмалар	$n \rightarrow \pi^*$	271	<1.0
14	Азобирикмалар	$n \rightarrow \pi^*$	340	<1.0

### Хромофорлар ва ауксохромлар, хромофорларнинг туташуви

Хромофорлар таркибида камида битта қўшбоғ бўлиши шарт (масалан  $C=C$ ,  $C\equiv C$ ,  $C=O$ ,  $C=N$ ,  $C\equiv N$ ,  $N=N$ ,  $N=O$ ,  $C=S$ ,  $S=O$  ва б.).

$\pi$ ,  $\pi^*$ -ўтишлар оддий алкенда ҳам амалга ошиши мумкин, лекин бунда содир бўладиган ютилиш узоқ УБ-соҳада содир бўлади. Қўшбоғларнинг туташуви ўтиш энергиясини камайтиради, ютилиш катта тўлқин узунлиги томонга силжийди. Агар туташувда қўшбоғларнинг сони етарли бўлса, ютилиш спектрнинг кўринувчан соҳасига силжиши мумкин, бирикма рангли бўлади. Масалан,  $\beta$  – каротин (сабзи ва яшил баргларида топилган сариқ пигмент) таркибида 11 та иккиламчи  $C-C$  туташ боғлар мавжуд. Шунинг учун бу модда спектрининг кўринувчан соҳасида ( $\lambda_{\max} = 451$  нм) нур ютиш хусусиятига эга.

Туташ системанинг ютилиш максимуми ( $\lambda_{\max}$ )га таъсирини этилен – 180 нм, гексадиен-1,5 – 185 нм, бутадиен-1,3 – 217 нм, гексатриен-1,3,5 – 253 нм каби моддалар мисолида ҳам кўриш мумкин. Хромофорларнинг ютилиш чизиқлари ва уларнинг интенсивлиги хромофор тутган ва шахсий ютилиш

чизиғига эга бўлмаган атомлар гуруҳларининг табиатига қараб ўзгариши мумкин. Бундай гуруҳлар ауксохромлар деб аталади. Ауксохромларга қуйидаги гуруҳлар мисол бўлади:  $-\text{OH}$ ,  $-\text{OCH}_3$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ , уларга галогенларни ҳам киритиш мумкин.

Моддалар тузилиши ва эритувчилар таъсири туфайли юзага келадиган спектрал ўзгаришлар характеристикаси учун қуйидаги махсус терминлар қабул қилинган:

- *гипсохромли силжиши* (кўк соҳага силжиш) – ютилиш чизиқларининг спектрнинг қисқа тўлқинли соҳасига силжиши;
- *батохромли силжиши* (қизил соҳага силжиш) – ютилиш чизиқларининг узун тўлқинли соҳага силжиши;
- *гиперхромли эффект* – ютилиш интенсивлигининг ортиши;
- *гипохромли эффект* – ютилиш интенсивлигининг камайиши.

Ауксохром таъсир натижасида ютилиш чизиғининг катта (батохром) ёки кичик (гипсохром) тўлқин узунлиги томонига силжиши содир бўлади.

Ютилиш чизиқларининг силжиши ва уларнинг интенсивлигининг ўзгариши хромофорларнинг ўзаро бир-бирлари билан таъсирлашиши натижасида ҳам кузатилиши мумкин. Этилен ( $-\text{C}=\text{C}-$ ) боғларнинг туташуви ютилишнинг батохром силжишини юзага келтиради. Ауксохромлар билан таъсирлашиш ва туташуш эффекти ҳамда кўпгина хромофорларнинг ютилиши спектрнинг спектрал анализ учун қулай бўлган яқин УБ- ва кўринувчан соҳасида намоён бўлишига сабабчи бўлади.

$\lambda_{\text{max}}$  қийматининг катта тўлқин узунлиги томонга силжиши (бирирма молекуласининг тузилиши ўзгарганда) рангни сариқдан қизил, кейин кўкдан яшилга ўтиши ранг чуқурлашуви дейилади, ёки батохром эффект дейилади;  $\lambda_{\text{max}}$  қийматининг кичик тўлқин узунлиги томонга силжиши рангнинг кўпайиши, ёки гипсохром эффект дейилади (4-жадвал). Квант назариясининг асосий нисбатидан ( $E=hc/\lambda$  [ $E$ –нурланиш квантининг энергияси,  $h$ – Планк доимийси ( $6,62 \cdot 10^{-27}$  эрг/с),  $c$  – ёруғлик тезлиги ( $3 \cdot 10^{17}$  нм/с)]) рангли моддаларнинг молекулаларини қўзғалиш энергиясини 35-70 ккал/молга тенглаштириш мумкин. Бир қатор ҳолатларда УБ-спектрага ўрганилаётган моддани эритиш учун фойдаланилган эритувчи катта таъсир кўрсатади. Шу аснода, инерт эритувчини кислоталига (анилинлар учун) ёки ишқорлига (феноллар учун) алмаштирилган вақтда спектрда ўзгаришлар кузатиш билан фенол ва анилинларни осонлик билан аниқлаш мумкин.

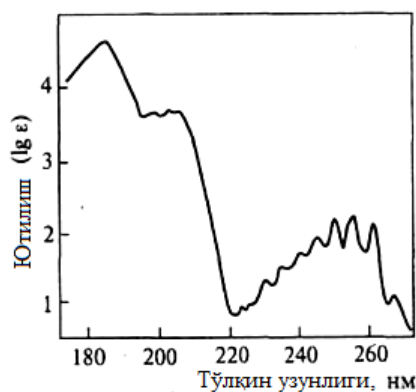
## Электрон спектрларда ютилиш чизиқларининг синфланиши

Қуйида бензол ва унинг ҳосилалари ютилиш чизиқларининг синфланиши келтирилган (6-жадвал). Бензолнинг баъзи бир ҳосилаларининг спектрлари 4-5 расмларда берилган.

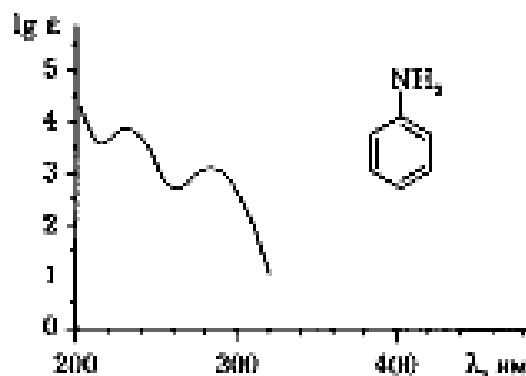
6-жадвал

Бензол ва унинг ҳосилалари ютилиш чизиқларининг синфланиши

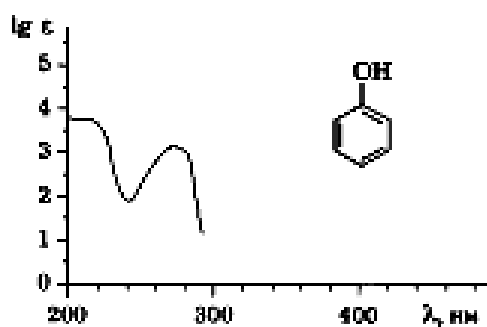
Ўриндош	<i>E</i>	<i>K</i>	<i>B</i>	<i>R</i>
	$\epsilon (>30000)$	$\epsilon (\approx 10000)$	$\epsilon (\approx 300)$	$\epsilon (\approx 50)$
	$\lambda_{\max}, \text{нм}$	$\lambda_{\max}, \text{нм}$	$\lambda_{\max}, \text{нм}$	$\lambda_{\max}, \text{нм}$
<i>Электронодонорли ўриндошлар (n-<math>\pi</math>-туташув)</i>				
H	184	204	254	
-R	189	208	262	
-OH		211	270	
-OR		217	269	
-NH <sub>2</sub>		230	280	
<i>Электроноакцепторли ўриндошлар (+M-эффект, -I-эффект, n-<math>\pi</math>-туташув)</i>				
-F		204	254	
-Cl		210	257	
-Br		210	257	
-I		207	258	
<i>Электроноакцепторли ўриндошлар (<math>\pi</math>-<math>\pi</math>-туташув)</i>				
-C=CH <sub>2</sub>		248	282	
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>		250		
-CHO		242	280	328
-C(O)R		238	276	320
-CO <sub>2</sub> H		226	272	
-CN		224	271	
-NO <sub>2</sub>		252	280	330



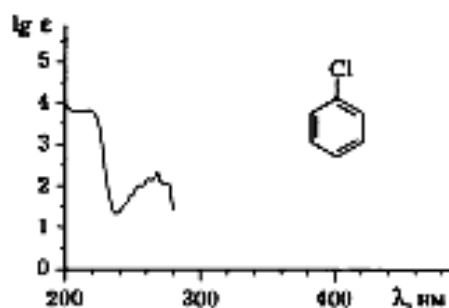
4-расм. Бензолнинг УБ-спектри



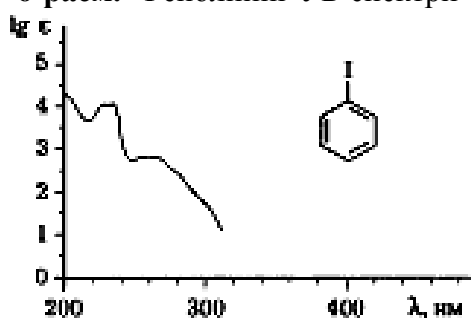
5-расм. Анилиннинг УБ-спектри



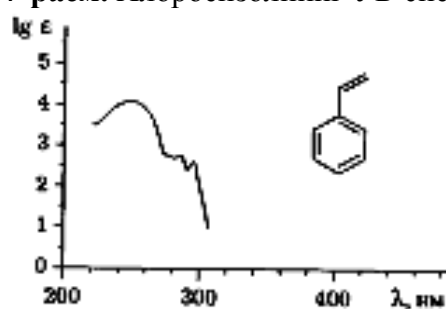
6-расм. Фенолнинг УБ-спектри



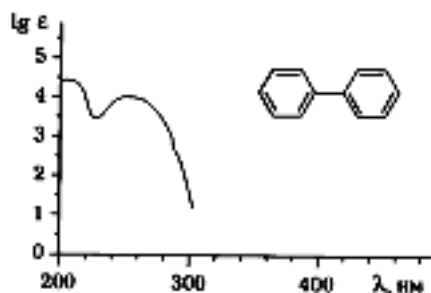
7-расм. Хлорбензолнинг УБ-спектри



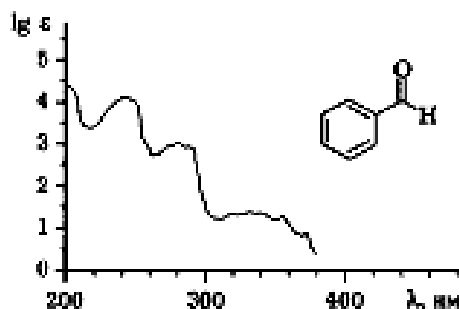
8-расм. Йодбензолнинг УБ-спектри



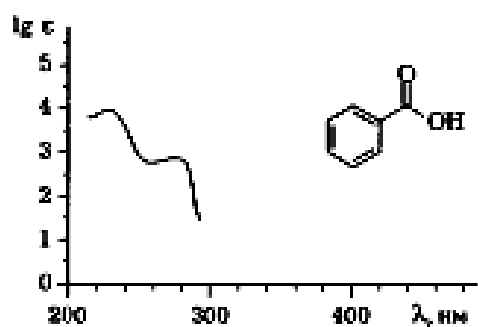
9-расм. Стиролнинг УБ-спектри



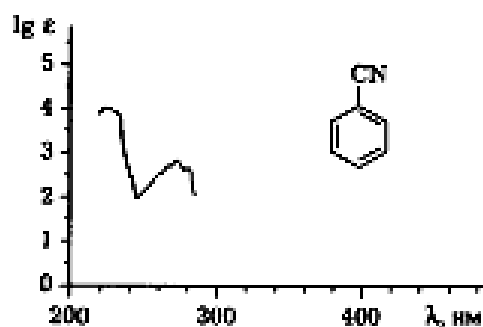
10-расм. Дифенилнинг УБ-спектри



11-расм. Безальдегиднинг УБ-спектри



12-расм. Бензой кислотанинг УБ-спектри



13-расм. Бензонитрилнинг УБ-спектри

УБ спектроскопия усулида кузатиладиган R- чизикни карбонил гуруҳ типигади изолирланган хромофордаги  $n \rightarrow \pi^*$ - ўтиш билан боғлаш мумкин. R- чизиклар кучсиз интенсивлик билан фарқланади ( $\epsilon < 100$ ).

Бу ютилиш чизиклари учун, қутбсиз эритувчини қутбли эритувчига алмаштириш вақтида гипсохромли силжиш хос.

$n \rightarrow \pi^*$ -хромофорни  $\pi \rightarrow \pi^*$ -хромофор системасига туташ ҳолатда киритиш орқали R- чизикнинг батохром силжишига эришилади (13-расм ( $\lambda_{\max}=328$  нм)). Аксинча,  $n \rightarrow \pi^*$ -хромофорга ауксохромни (ОН ёки  $\text{NH}_2$ ) бирикиши чизикнинг гипсохромли силжишига сабаб бўлади. Баъзида R- чизиклар нозик структурага эга бўлади.

K-чизикларни кўпинча “бензол” чизиги дейилиб, у кўпинча ароматик халқадаги таъқиқланган  $\pi \rightarrow \pi^*$ - ўтишларнинг бири билан тушунтирилади. Чизик ўртача интенсивлик билан характерланади ( $\epsilon \approx 100-1000$ ); эритувчи алмаштирилган вақтда силжимайди, одатда нозик тузилишга эга. Алкилбензолларда R- чизикнинг ҳолати 260 нм яқинидаги соҳага тўғри келади. Бензол халқага хромофор ёки ауксохромли гуруҳнинг киритилиши R- чизикнинг батохром силжишига олиб келади ва интенсивлигининг ортишига сабабчи бўлади, галоген алмашган ҳосилаларда галогеннинг I-эффекти туфайли интенсивлик кўп ортмайди. Бунда чизикнинг нозик структураси йўқолиб кетиши мумкин.

E ( $E_1$  ва  $E_2$ )- чизиклар ароматик системалар учун характерли ҳисобланади. Бензол учун  $E_1$  ва  $E_2$  символлар билан 180 ва 200 нм даги чизиклар белгиланади. Бензолда хромофор учун руҳсат этилган  $\pi \rightarrow \pi^*$ - ўтиш учун мос келадиган  $E_1$ -чизик, фақат кўпядроли ароматик системаларда яқин ультрабинафша соҳасида чиқади. Бу чизик юқори интенсивлиги билан фарқланади.  $E_2$ - чизик ҳар доим 200-230 нм соҳада алмашган ароматик системаларнинг спектрларида кузатилади. Интенсивлиги узоқ тўлқинли K - чизикникидан паст, лекин баъзи бир алмашинган бензолларда E- ва K - чизиклар интенсивлигининг нисбати айланиши мумкин. Ароматик бирикмаларнинг спектрларида E- ва R –чизиклар ҳар доим бўлади.

Алмашинган бензолнинг спектрида бу чизиклар билан бирга R – чизикларнинг бўлиши, бензол халқасини ўз ичига олган туташ хромофорнинг борлигидан далолат беради

### **Органик бирикмаларни идентификациялашда УБ-спектроскопия усулидан фойдаланиш**

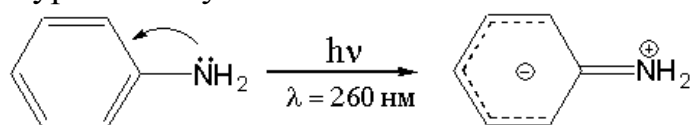
б-жадвалда бензол ва унинг моноалмашган ҳосилаларининг электрон спектрлари ва тажриба натижалари келтирилган.

Бензолнинг УБ-спектри  $\pi \rightarrow \pi^*$ - ўтишлар сабаб бўладиган учта чизикка эга (бензол ҳақасининг локал қўзғалиши):  $\lambda_{\max}=184$  нм ( $\epsilon_{\max}=60000$ );  $\lambda_{\max}=204$  нм ( $\epsilon_{\max}=7400$ );  $\lambda_{\max}=255$  нм ( $\epsilon_{\max}=230$ ).

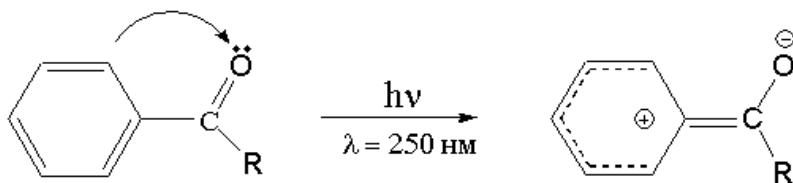
Бензолда кузатиладиган барча чизиклар  $\pi \rightarrow \pi^*$ - ўтишлар билан боғлиқ.

Ароматик халқаларнинг конденсатланиши (бензол  $\rightarrow$  нафталин  $\rightarrow$  антрацен  $\rightarrow$  ва ҳ.з.) ютилиш чизикларини батохром силжишига олиб келади.

Юқорида келтирилган мисоллардан кўришиб турибдики, ўриндошларни ароматик халқанинг ютилиш чизигини холатига таъсири ўриндош характери билан аниқланади. Фақат индуктив таъсирга эга бўлган ўриндошлар (масалан,  $-\text{CH}_3$ ) спектр кўринишини ўзгартирмайди. Ароматик халқанинг  $\pi$ -системаси билан туташадиган ўриндошлар сезиларли таъсир кўрсатади. Бундай ўриндошларга  $-\text{OH}$ ,  $-\text{OR}$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{C}=\text{C}-$ ,  $>\text{C}=\text{O}$ ,  $-\text{NO}_2$  гуруҳлар киради. Молекулада бундай ўриндошларнинг бўлиши заряд кўчиши билан борадиган ўтишларга олиб келади, яъни УБ-спектрада заряднинг (электроннинг) кўчиши кузатилади. Уларга электроннинг молекуланинг бир қисмида локаллашган орбиталдан, унинг бошқа қисмида локаллашган орбиталга ўтиши мисол бўлади. Мисол учун анилиндаги  $-\text{NH}_2$  гуруҳ гетероатомидан ароматик халқага электрон ўтишини кўрсатиш мумкин:



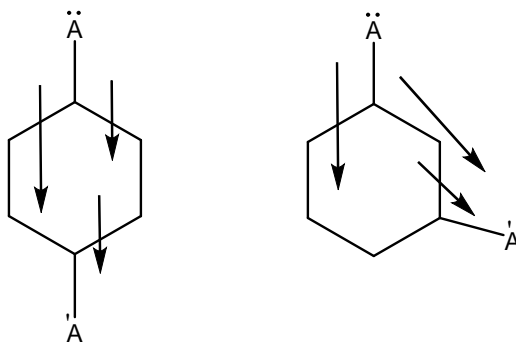
$-\text{C}=\text{C}-$ ,  $>\text{C}=\text{O}$ ,  $-\text{NO}_2$  типидagi ўриндошларда электронни ўтиш йўналиши қарама-қарши томонга, яъни халқадан аксинча ўриндош томонга содир бўлади:



Электроннинг (заряднинг) ўтиш чизиги:

- заряднинг донордан акцепторга ўтиши;
- халқадан акцепторга;
- донордан халқага ўтиши билан боғлиқ.

Масалан, *p*-нитроанилинда зарядни донордан акцепторга ва халқадан акцепторга ўтиши электрон силжишларнинг йўналиши мос тушганлиги сабабли спектрада заряднинг ўтиш чизиги битта (14-расм, чапда), *m*-нитроанилин (14-расм, ўнгда) электроннинг донордан акцепторга силжиш йўналиши электроннинг халқадан акцепторга ўтиш йўналиши билан мос тушмайди.



**14-расм.** Нитроанилин изомерлари мисолида электрон силжишларни моделлаштириш (A – нитрогуруҳ, A' – аминогуруҳ)

### Назорат учун саволлар

1. Туташ қўшбоғларнинг сони ортиб бориши билан сари ютилиш узок тўлқинлар томонга силжиб боради. А, Б, В бирикмалар  $C_5H_8$  формулага эга ва гидрирлаш вақтида улар н-пентанга айланади. Уларнинг УБ-спектрларида куйидаги максимумлар мавжуд: А –176 нм, Б –211 нм, В – 217 нм. В бирикманинг формуласи.....?

Жавоб вариантлари:

1. Пентан.
2. 2-метилбутадиен-1,3.
3. Пентен-1.
4. Пентен-2.

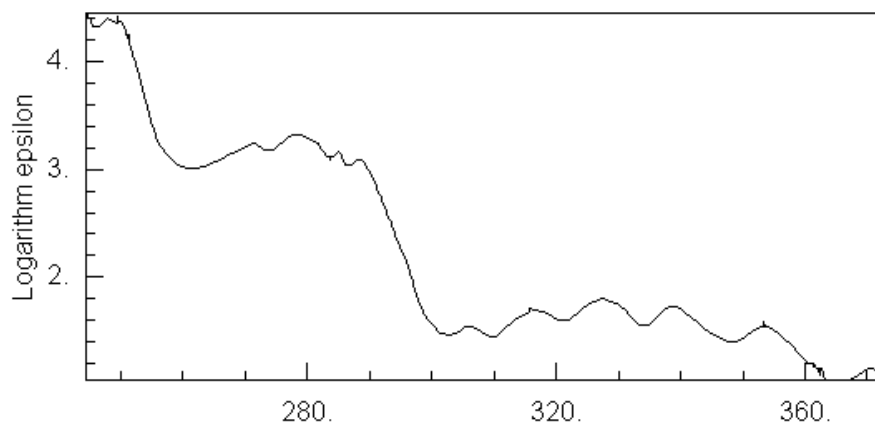
2. о-, м-, п-диметиламинобензальдегид изомерлари учун заряднинг кўчиб ўтиш чизиғи 327, 262, 262 нм соҳада ётади. Заряднинг кўчиб ўтиш чизиғи 327 нм да бўлган изомернинг мезоформуласи куйидаги кўринишга эга .....

3. Метиламин спектрида ютилиш чизиқлари максимумлари 173 нм ва 213 нм га тенг, улар куйидаги ўтишларга мос келади.....

4. ... эффект триэтиламин  $n \rightarrow \sigma^*$  чизиғини метиламинга нисбатан батохром (217нм) силжишига сабаб бўлади.

5. Бензол учун энг характерли ютилиш .....нм соҳада яққол намоён бўладиган чизиқ ҳисобланади.

6. Ацетон молекуласида ютилиш чизиқларининг синфланиши.....



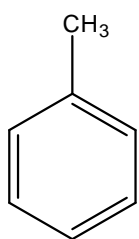
7. Бензолнинг диалмашган ҳосилалари учун берилган жадвал асосида электрон ўтишларга нисбатан пайдо бўладиган чизиқларни исталган иккита мисол учун кўриб чиқинг.

X	Y	Ўринбосар ҳолати	$\lambda_{\text{макс}}$ , нм (lg)		
ОН	ОН	1,2	214 (3.80)	276 (3.36)	
ОН	ОН	1,3	216 (3.83)	274 (3.30)	
ОН	ОН	1,4	225 (3.78)	295 (3.49)	
ОН	NO <sub>2</sub>	1,2	230 (3.59)	278 (3.81)	351 (3.48)
ОН	NO <sub>2</sub>	1,3	274 (3.78)	333 (3.29)	

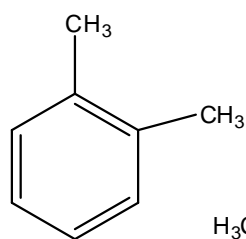
OMeCHO		1,2	254 (4.00)	322 (3.66)	
OMeCHO		1,3	252 (3.92)	314 (3.45)	
NH <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	1,2	229 (4.20)	275 (3.70)	405 (3.70)
NH <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	1,3	235 (4.20)	373 (3.18)	
COOH	COOH	1,2	230 (3.96)	280 (3.02)	
COOH	COOH	1,3	230 (4.08)	282 (2.98)	

8. о-Нитрофенол мисолида ютилиш чизиқларини синфланишини кўрсатинг.

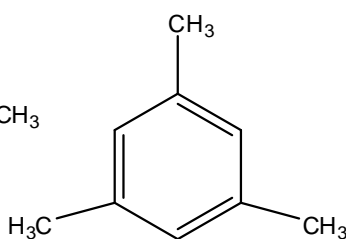
9. Бирикмалар учун уларнинг тузилишига қараб ютилиш максимумларини жойлаштиринг (279,263,261,266 нм):



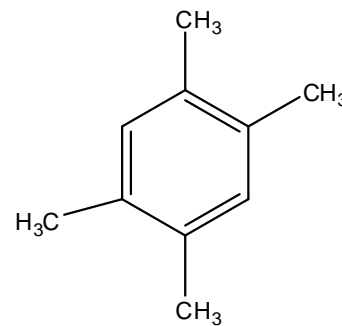
толуол



о-ксилол

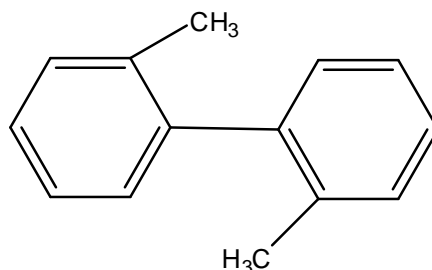


мезитилен



дурол

10. Қуйида берилган бирикманинг спектрини бензолниг моноалмашган ҳосиласининг спектрига ўхшашлигига ..... сабабли юзага келадиган фазовий қийинчиликлар ҳисобланади.



$\lambda_{\text{макс}} = 225 \text{ нм}$

(lg=2.21)

## ИҚ-СПЕКТРОСКОПИЯ

Органик бирикмаларнинг барча хоссаларини ҳисобга олган ҳолда ИҚ (инфрақизил)-спектр бирикманинг тузилиши ҳақида энг кўп маълумотни бера олади. Инфрақизил спектр худди масс-спектр каби шу органик бирикма учун характерли бўлиб, иккита бирикмани бир-биридан ажратишни ва янги бирикмани тузилишини аниқлаш учун ишлатилади. Бу усул ёрдамида тебраниш спектрларини ўрганиб, молекулаларнинг фазовий тузилиши ва боғ табиатини характерлаб бериш мумкин (қутблилик, қутбланиш, карралик).

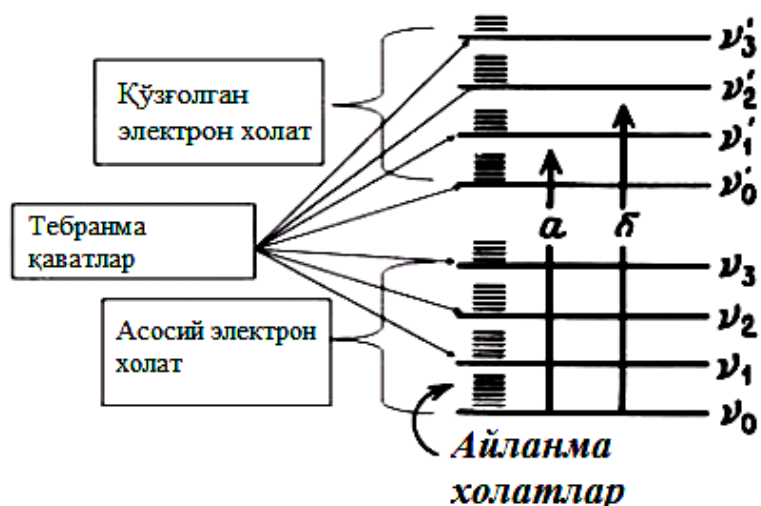
### ИҚ-спектроскопиянинг физик асослари

Молекула доим тебранади: унинг боғлари чўзилади (ва қисқаради), ундан ташқари бир-бирига нисбатан эгилади. Молекулалар тебранишларининг ўзгариши, кўринувчан спектрнинг қизил соҳасидан ташқарисида ётадиган инфрақизил соҳада ютилишни келтириб чиқаради. Инфрақизил соҳада ютилиш ҳолатини кўрсатиш учун герцда эмас, тўлқин сонида ( $\text{см}^{-1}$ ) ифодаланадиган частотадан фойдаланилади. Тўлқин сони ва энергия ўзаро қуйидаги нисбатлар билан боғланган:

$$1 \text{ см}^{-1} = 2,858 \text{ кал/моль} = 1,986 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/молекула} = 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ эВ/моль}.$$

Тўлқин сони – бу 1 см га сиғадиган тўлқинлар сони (бу сантиметрда берилган тўлқин узунлигига тесқари бўлган катталиқ).

Асосий ва қўзғалган ҳолатлардаги молекула квантланган дискрет энергетик поғоналар тўпламига эга. Асосий ва қўзғалган қаватлар энергияларининг энг катта фарқи электрон ҳолатлар учун мос келади. Молекуладаги тебранишлар (боғларнинг чўзилиши-қисқариши, улар орасидаги бурчакларнинг ўзгариши)ни хар хил турларида тебранма қаватлар ётади. Шунингдек, айланма тебранишлар деб аталадиган яқин жойлашган қаватлар ҳам мавжуд. Молекуланинг барча энергетик ҳолатларини қуйидагича энергетик қаватларнинг схемаси кўринишида тасвирлаш мумкин (15-расм).



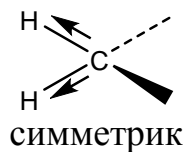
**15-расм.** Молекуланинг электрон, тебранма ва айланма ҳолатлар бўйича энергетик поғоналарининг схемаси

Битта электрон поғона чегарасида энергияси кичик бўлган тебранма поғоналар ўртасидаги ўтишлар инфрақизил соҳада нурланиш ютилиши натижасида содир бўлади ва инфрақизил спектроскопия усулида ўрганилади. Кўп атомли молекулада барча ядролар мураккаб айланма ҳаракатлар бажаради. Бундай молекуланинг потенциал энергиясини боғлар ва валент бурчакларнинг потенциал энергияларининг йиғиндиси кўринишида ва гармоник яқинлашувда боғларнинг мустақамлигини, валент бурчакларни характерлайдиган ва уларни таъсирлашувларини инобатга оладиган кучли доимийлар тўплами билан тасвирлаш мумкин.

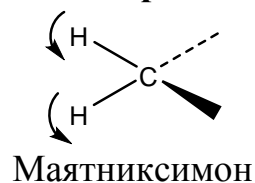
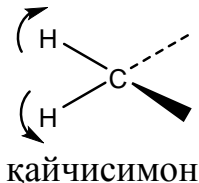
Кўп атомли молекуланинг мураккаб тебранма ҳаракатини нормал тебранишлар кўринишида тасвирлаш мумкин, чунки молекуланинг барча ядролари бир хил частота ва фаза билан тебранади. Нормал тебранишларни атомларнинг боғ ўқлари бўйича ҳаракатланишини характерлайдиган валент ва боғ узунлиги ўзгармай, валент бурчаклар ўзгарадиган деформацион тебранишларга бўлиш мумкин. Валент тебранишларнинг частоталари деформацион тебранишларнинг частоталаридан анча катта. Ядроларнинг тебранма ҳаракатларини кўзғалиши вақтида дипол моментлари ўзгарадиган молекулалар инфрақизил соҳада ютилишга эга.

**Ядроларнинг тебранма ҳаракатлари турлари.** Боғ узунлигини ўзгаришига олиб келадиган ядроларнинг тебранма ҳаракатлари валент тебранишлар дейилади. Боғлар ўртасидаги бурчакларни ўзгаришига олиб келадиган ядроларнинг тебранма ҳаракатлари деформацион тебранишлар дейилади (16-расм).

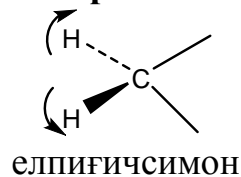
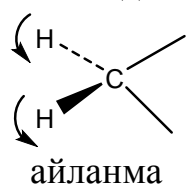
## Валент тебранишлар



## Текисликдаги деформацион тебранишлар



## Текисликдан ташқаридаги деформацион тебранишлар



16-расм. ИҚ-спектрдаги тебранишлар тури

Электромагнит спектрнинг инфрақизил соҳасига  $100$  дан  $10000\text{ см}^{-1}$  гача бўлган тўлқин сонлари интервали тўғри келади.

Оддий лаборатория ИҚ-спектрометри  $200-4000\text{ см}^{-1}$  интервалида ишлайди.

Органик молекулаларнинг ИҚ-спектрларида қуйидаги соҳалар мавжуд:

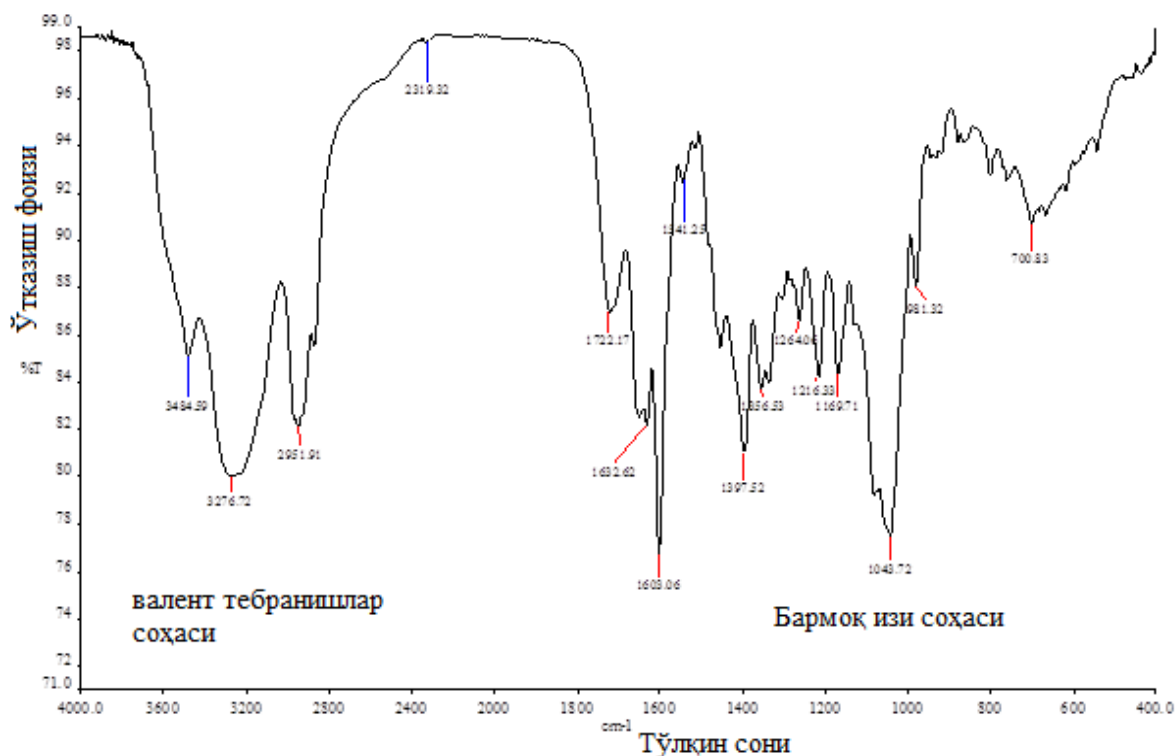
- молекуляр скелет тебранишлари соҳаси, хусусан С-С боғнинг;
- функционал гуруҳларнинг соҳаси (атомларнинг маълум бир гуруҳи ИҚ спектрда ютилишнинг характеристик частотасига эга, яъни маълум гуруҳ маълум частотадаги нурни ютади, бу частота ўзгармас ҳисобланади).

$1500\text{ см}^{-1}$  дан паст соҳада молекула учун индивидуал бўлган тебранишлар чизиғи–“бармоқ изи” соҳаси жойлашган.

Структуравий анализ учун инфрақизил спектрлар одатда  $4000$  ва  $700\text{ см}^{-1}$  частоталар интервалда олинади (тўлқин узунликлари  $2,5$  дан  $15\text{ мкм}$ гача). Одатда спектрни ёзиш вақтида абцисса ўқида чизикли шкалада тўлқин сони қиймати  $\nu$  ( $\text{см}^{-1}$ ), ордината ўқида – ўтказиш қиймати  $T(\%)$  қўйилади.

Деформацион тебранишларнинг энергияси валент тебранишлар энергиясидан кичик, деформацион тебранишлар катта тўлқин узунликларида кузатилади (кичик тўлқин сонларида). Валент тебранишларнинг частотаси тегишли боғларнинг мустаҳкамлиги билан боғлиқлиги аниқланган. Учламчи боғлар ( $2300-2000\text{ см}^{-1}$  да ютилиш) иккиламчи боғларга нисбатан мустаҳкам ( $1900-1500\text{ см}^{-1}$ ), улар ўз навбатида бирламчидан мустаҳкамроқ (С-С, С-Н, С-О боғлар  $1300-800\text{ см}^{-1}$  да ютади).

ИҚ-спектроскопияда моляр экстинция коэффициенти 0 дан 200 гача бўлган қийматни қабул қилади. Унинг катталиги шу тебраниш туфайли юзага келадиган молекула диполь моменти ўзгаришининг квадратига пропорционал. ИҚ-спектрда валент тебранишларга хос бўлган максимумлар энг катта интенсивликка эга (17-расм).



**17-расм.** Органик моддаларнинг валент тебранишлар соҳаси ва “бармоқ изи” соҳаси кўрсатилган ИҚ-спектри

### ИҚ-спектрометрнинг ишлаш принципи

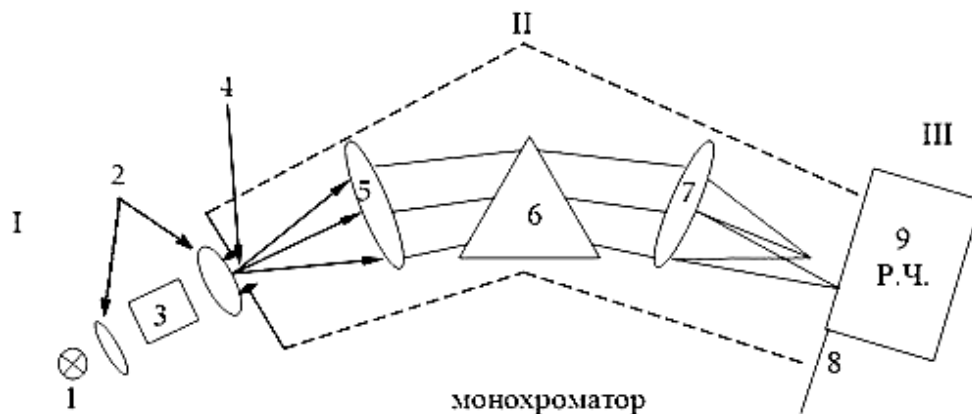
Инфрақизил спектрлар одатда (ҳар доим эмас) фоиз ўтказишнинг тўлқин сонига боғлиқлиги кўринишида ёзилади. Замонавий икки нурли спектрометр маълум бир тўлқин узунлигидаги ютилмаган ёруғлик интенсивлиги фоизида қайд этади. Ютилиш ёки оптик зичлик, нур ўтказувчанлик билан боғлиқлиги қуйидаги тенглама ёрдамида ифодаланади:

$$A = -\lg I/I_0.$$

Ўтказиш (T) = 100 %, бунда A = 0 ва I/I<sub>0</sub> нисбатга тенг.

Исталган спектрал жихознинг принципиал схемаси (18-расм) учта асосий қисмдан иборат: ёритувчи I, спектрал (оптик) II, ва қабул қилиб қайд этувчи III қурилмалар. Ёритувчи қисмга ёритгич манбаи (1) ва конденсор линзалар ёки кўзгулар (2) киради, улар асбобнинг кириш тирқишини (4) бир текис ёритади. Кюветада (3) ўрганилиши керак бўлган намуна ва эталон намуна ўрнатилади.

Спектр қисми (монохроматор) кириш объективига (5) ва дисперширловчи системага (6), чиқиш объективига (7) эга. Фокал текисликда (8) қайд этиш қурилмаси (9) ўрнатилади.



18-расм. ИҚ - спектрал қурилманинг принципиал схемаси

Нурланиш манбалари. Кўринувчан ва яқин ИҚ-соҳаларда вольфрам ипли газ тўлдирилган лампалар ишлатилади, қисқа тўлқинли ва ўрта соҳаларда – Нерст штифти, силитли стержень (глобар) ишлатилади, у кремний карбидидан тайёрланади, диаметри 4-6 мм; ишчи кучланиши 35-50 М, ток кучи 3-5 А, нурланиш қуввати 150-250 Ме, харорат 1200<sup>0</sup>С.

*Монохроматор* – оптик қурилма бўлиб, кенг спектрал соҳада ва тўлқин узунлигининг жуда тор интервалида ўлчашлар имконини беради. Монохроматорнинг асосий элементи призма кўринишидаги диспергирловчи системаси ёки дифракцион панжаралардир. Фокусловчи элемент сифатида кўзгу хизмат қилади, чунки одатда фойдаланиладиган частоталарнинг инфрақизил диапазонда шаффоф бўла оладиган линзаларни тайёрлаб бўлмайди.

Нурланишни қабул қилувчилари иссиқлик ва фотоэлектрикларга бўлинади.

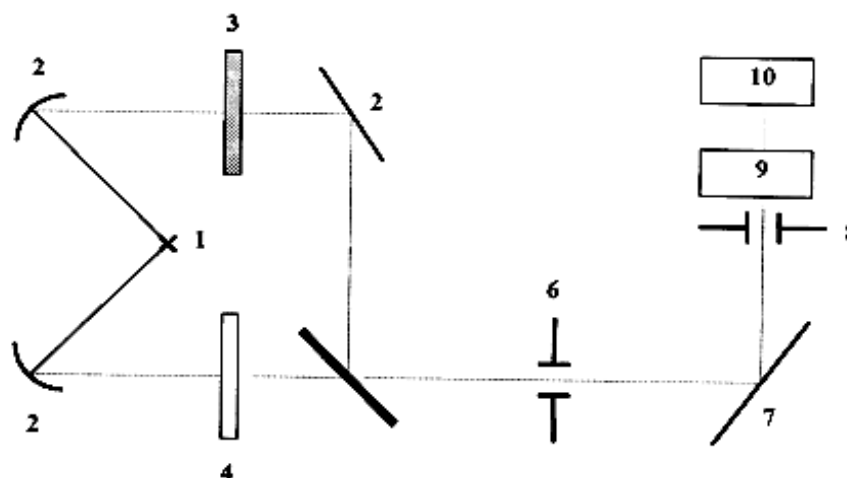
Спектрнинг ИҚ-соҳаларида қабул қилувчилар сифатида фотоэлементлар, фотоқаршилиқлар, болометрлар ишлатилади. Болометрнинг ишлаш принципи қиздирганда термосезгир элементнинг электр қаршилигини ўзгаришига асосланган. Болометрга тушадиган инфрақизил нурланиш кичик кучланишли токни келтириб чиқаради, у ўзгарувчан ток кучайтиргичи ёрдамида кучайтирилади, спектрал эгри ёзиб борилади.

*Ютилиш спектрларини қайд этиш.* Одатда спектр  $k = f(\lambda)$  ёки  $k = f(\nu)$  координаталарда қайд этиш мосламаси ёрдамида ёзиб борилади. Спектрометрлар ёзиш усулига қараб бир ёки икки нурлиларга бўлинади. Замонавий икки нурли спектрометрлар қаттиқ ва суюқ моддаларни частоталарнинг турли диапазонида ютилишнинг инфрақизил спектрларини

автоматик тарзда ўтказиш фоизларида қайд этиш имконини беради. Масалан, ИКС-29 спектрометри  $4200-400\text{ см}^{-1}$  частоталар интервалида ишлайди.

Градуировка тўлқин сонлари, максимумлари, ютилиш чизиқлари аниқ бўлган эталон спектрлар (масалан полистирол) бўйича олиб борилади.

Спектрометрлар – оптик қурилмалар бўлиб, иккита ёруғлиқ оқимлари интенсивликлари нисбатини тўлқин узунлигига боғлиқ равишда ўлчаш имконини беради. Ўрганилаётган модданинг ютилиш спектрини қайд этиш сифатини ошириш учун фон сигналини – атмосфера газлари, кювета ойналари томонидан ютилишини йўқотиш керак. Шу мақсадда спектрометрда икки нурли схема ишлатилади, у фон сигналини компенсациялаш имконини беради (19-расм).



19-расм. Икки нурли спектрометрнинг принципиал схемаси

(1) манбадан чиқаётган ИҚ-нурланиш кўзгулар системаси (2) ёрдамида иккита нурга бўлинади. Ишчи нур тўплами намуна солинган кюветадан (3), таққослаш нур тўплами эса – фон компенсатори (4) орқали ўтади. Дискотулятор ёрдамида (5) нур тўпламлари навбатма-навбат монохроматорнинг кириш тирқишига йўналтирилади ва у орқали – дифракцион панжарага (7) юборилади, у нурланишни спектрга парчалайди ва уни чиқиш тирқишига (8) юборади. Тирқишнинг монохроматик тасвири қабул қилгичга–висмутли болометрга (9) келиб тушади. Ўрганилаётган намуна бўлмаса, ишчи нур тўплами билан таққослаш нур тўплами бир хил бўлади, қабул қилгичда бу нурларнинг тўпламларидан келадиган сигналлар чиқариб ташланади; чиқишда сигнал бўлмайди. Ишчи нур тўплами ўрганилаётган модда томонидан ютилган вақтда қабул қилгичга турли интенсивликдаги нурлар келиб тушади, натижада қабул қилгичда ўзгарувчан сигнал юзага келади. Сигнал кучайтирилганидан ва қайта ўзгартирилганидан кейин қайд этиш мосламаси (10) ишга тушади. Панжара секин ҳаракат қила бошлаганда тирқиш (8) навбатма-навбат спектрнинг тор қисмларини кесиб ташлайди, қайд этиш лентасида ўтказишни тўлқин узунлигига боғлиқлик эгри чизиги чизилади.

ИҚ-спектрларни олиш учун намуналарни тайёрлаш. Инфрақизил спектрларни газсимон, суюқ, қаттиқ моддалар учун ўлчаш мумкин. Газсимон моддалар спектрларини ўлчаш учун махсус газ кюветаларидан фойдаланилади.

Инфрақизил спектрларини олиш учун намуна тайёрлаш қуйидаги усулларда олиб борилади:

1. Қаттиқ моддалар учун.

а) пасталар: 10-20 мг қаттиқ модда 1-2 томчи иммерсион суюқлик (вазелин мойи, полифторуглеводород, гексахлорбутадиен ва б.) билан яхшилаб аралаштирилади, тайёрланган паста NaCl (ёки KBr) пластинкалари ўртасида сиқилади ва спектрометрга ўлчаш учун ўрнатилади. Курилманинг иккинчи каналига NaCl (ёки KBr) пластинкалари ўртасида иммерсион суюқлик жойлаштирилади,

б) KBr солинган дисклар: қаттиқ модда намунаси (1–3 мг) яхшилаб ховончада спектроскопик калий бромиди (150–200 мг) билан яхшилаб аралаштирилади ва аралашма  $7,5\text{--}10\text{ т/см}^2$  босим остида, 2-5 минут давомида 2-3 см.уст. вакуумда прессланади. Намунанинг ютилиш спектри ҳавога нисбатан ёки асбобнинг иккинчи каналига жойлаштирилган тоза KBr га нисбатан олинади.

2. Суюқ моддалар учун. Суюқликнинг ингичка пленкаси NaCl (ёки KBr) пластинкалари ўртасига сиқилади ёки ингичка қатламли (0,01–0,05 мм) кюветалар ишлатилади. асбобнинг иккинчи каналига икки марта катта бўлган қалинликдаги тоза NaCl (ёки KBr) пластинкалари ёки тегишли бўш кюветалар жойлаштирилади.

3. Эритмалар. Тўғри келадиган органик эритувчидаги ўрганилаётган намунанинг эритмаси (суюқ ёки қаттиқ) (одатда 0,5-1,5% концентрациялари олинади) 0,1-1 мм қалинликдаги кюветага солинади. Эритманинг спектри тоза эритувчига нисбатан олинади.

Эритувчилар сифатида кўпинча углерод тўрт хлориди ва хлороформ ишлатилади. Вазелин мойи ва эритувчилар спектрнинг барча соҳасида шаффоф бўлмайди. Масалан, вазелин мойи  $3000\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ , 1460 ва  $1380\text{ см}^{-1}$  да кучли ютади. ИҚ-спектроскопия усулида анализларни олиб бориш учун ўрганилаётган модданинг концентрацияси тўғри танланиши керак. Бунинг учун қуйидаги қоидаларга амал қилиш мақсадга мувофиқ ҳисобланади.

Структуравий анализни олиб бориш учун энг оптимал шароит қилиб, ютилиш максимумлари 80-95% бўлган интенсив чизиқлар олинadиган қават қалинлиги 9 (ёки концентрацияси) танлаб олинади.

Одатда, турли маълумотларда келтирилган жуда кучли интенсивликни намоён қилувчи карбонил гуруҳ ( $1700\text{--}1750\text{ см}^{-1}$ ), C–H валент тебранишлари  $2800\text{--}3000\text{ см}^{-1}$  ва шунга ўхшаш бошқа характеристик чизиқлар мисол бўлади.

Лекин баъзи ҳолатларда, масалан, кучсиз чизикларни текшириш учун спектрнинг алоҳида участкаларини съемкаларини қатлам қалинлигини оширган ҳолда такрорлашга тўғри келади.

### **Органик бирикмаларни идентификациялашда ИҚ-спектроскопия усулидан фойдаланиш**

Моддаларнинг тузилишини ўрганиш учун ИҚ-спектрларда: характеристик ютилиш чизиклари (функционал гуруҳларнинг тебранишлари ёки молекуладаги боғлар билан боғлиқ) дан фойдаланишга асосланган. Бундай характеристик ютилиш чизиклар намоён қилувчи гуруҳларга  $-\text{OH}$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NO}_2$ ,  $=\text{C}=\text{O}$ ,  $-\text{C}=\text{N}$  каби гуруҳлар мисол бўлади.

Ўрганилаётган моддани идентификациялаш, шу моддани ИҚ-спектри билан унинг стандарт намунасининг спектрини ёки стандарт спектрини солиштириш орқали олиб борилади.

Биринчи ҳолатда ИҚ-спектрлар навбатма-навбат битта қурилмада бир хил шароитларда (намунанинг агрегат ҳолати, модда концентрацияси, қайд этиш тезлиги) олинади. Иккинчи ҳолатда стандарт спектр олиш учун мос келадиган шароитларга риоя қилиш шарт (модда концентрацияси, асосий чизиклар учун мос келадиган нур ўтказувчанлик даражаси ва б.) бўлади.

Одатда калий бромиди ёки вазелин мойидаги пасталардан тайёрланган таблеткалар ёрдамида олинган ИҚ-спектрлар ишлатилади. Муҳим ва ишончли интерпретация қилинадиган характеристик ютилиш чизиклари молекулаларнинг асосий тебранишлари частотасининг қисқа тўлқинли соҳасида  $4000$  дан  $1500 \text{ см}^{-1}$  ( $2,5$  дан  $7$  мкм гача) жойлашади. Бу соҳа структуравий анализ учун бирламчи ахамиятга эга.

Инфракизил спектрнинг узун тўлқинли соҳаси ( $\nu < 1500 \text{ см}^{-1}$ ) одатда мураккаб ва характеристик чизиклар билан бирга ютилишнинг кўп сонли интенсив чизикларига эга, уларнинг ҳолати ва шакли ҳар бир мураккаб молекула учун индивидуал ҳисобланади. Бу вазият органик препаратларнинг структуравий анализда ИҚ-спектрнинг узун тўлқинли қисмининг ахамиятини оширади. Қуйи частотали интервал  $1350\text{--}400 \text{ см}^{-1}$  учун чизикларнинг махсус тўплами характерли, у “бармоқ изи” соҳаси дейилади. ИҚ-спектрларда ютилиш чизикларининг тўлиқ мос келиши модданинг тозаллигини билдиради.

**Алкил фрагментларнинг идентификацияси.**  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$  гуруҳлар учун спектрда  $\text{C-H}$  боғнинг валент ва деформацион тебранишлари туфайли юзага келадиган ютилиш чизиклари кузатилади.

Алкил фрагментлари  $\text{C-H}$  боғининг валент тебранишлари  $3000\text{--}2840 \text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилади. ИҚ-спектрини ўрганиш жараёнида қуйидаги қонидани эсда тутиш лозим:  $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{-H}$  боғларнинг валент тебранишлари одатда  $3000 \text{ см}^{-1}$  соҳадан

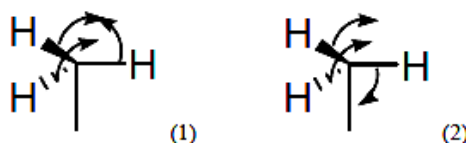
пастда кузатилади,  $C_{sp^2}-H$  ва  $C_{sp}-H$  боғларнинг валент тебранишлари  $3000\text{ см}^{-1}$  соҳадан юқорида ётади.

Метил гуруҳларнинг валент тебранишлари ( $CH_3$ )  $2962$  ва  $2872\text{ см}^{-1}$  соҳада иккита ютилиш чизиғи кўринишида кузатилади. Биринчиси – асимметрик валент тебранишлар натижасидир, унда метил гуруҳининг иккита  $C-H$  боғи чўзилади, учинчиси ( $\nu_{as} CH_3$ ) сиқилади. Иккинчи чизиқни симметрик валент тебранишлар ( $\nu_s CH_3$ ) келтириб чиқаради, барча учта  $C-H$  боғ фазада чўзилади ёки сиқилади. Бир нечта метил гуруҳларнинг борлиги тегишли чизиқлар интенсивлигининг ортишига олиб келади.

Метилен гуруҳларнинг валент тебранишлари ( $CH_2$ ) ютилиш чизиқлари ( $2962$  ва  $2853\text{ см}^{-1}$ ) кўринишида кузатилади, улар асиметрик ( $\nu_{as} CH_2$ ) ва симметрик ( $\nu_s CH_2$ ) валент тебранишлар туфали юзага келади.

#### Алкил фрагментлари $C-H$ боғларининг деформацион тебранишлари

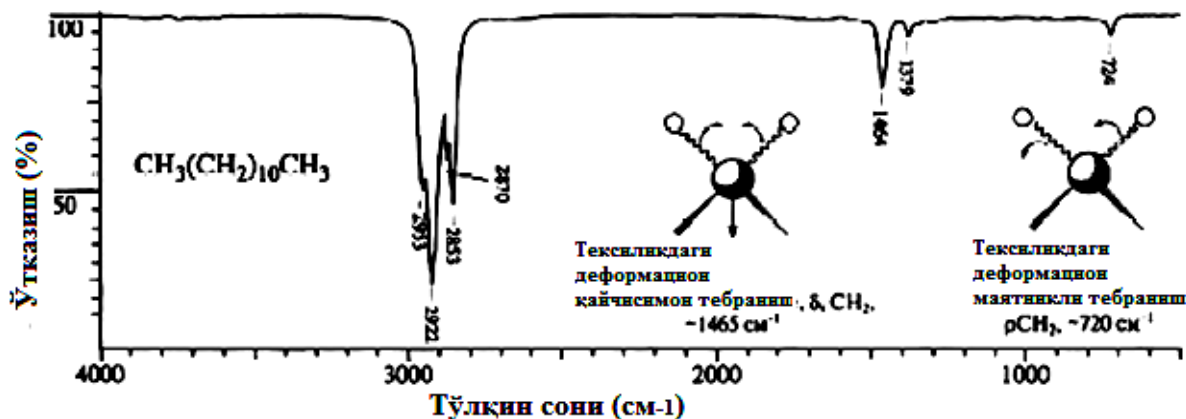
Метил гуруҳда иккита деформацион тебранишлар намоён бўлиши мумкин:  $1375\text{ см}^{-1}$  соҳада пайдо бўладиган симметрик деформацион тебранишлар ( $\delta_s CH_3$ ) ва  $1450\text{ см}^{-1}$  соҳада кузатиладиган асимметрик ( $\delta_{as} CH_3$ ) деформацион тебранишлар шулар жумласига киради (20-расм).



**20-расм.** Метил гуруҳидаги (1) симметрик деформацион тебранишлар ( $\delta_s CH_3$ ); метил гуруҳидаги асимметрик деформацион тебранишлар ( $\delta_{as} CH_3$ ) (2)

Ўз таркибида метил гуруҳи тутмаган бирикмаларнинг спектрларида  $1375\text{ см}^{-1}$  соҳасида нур ютилиш чизиқлари намоён бўлмайди, бу эса ўз навбатида модда тузилишини тасдиқлашнинг муҳим мезони ҳисобланади.

Метилен гуруҳида тўрт турдаги деформацион тебранишлар кузатилади: булар қайчисимон, елпиғичсимон, маятникли ва айланмасимон. Бунда энг кўп информатив ютилиш  $1465\text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилади, у қайчисимон деформацион тебранишлар туфайли юзага келади ( $\delta_s CH_2$ ) (21-расм, 7-жадвал).



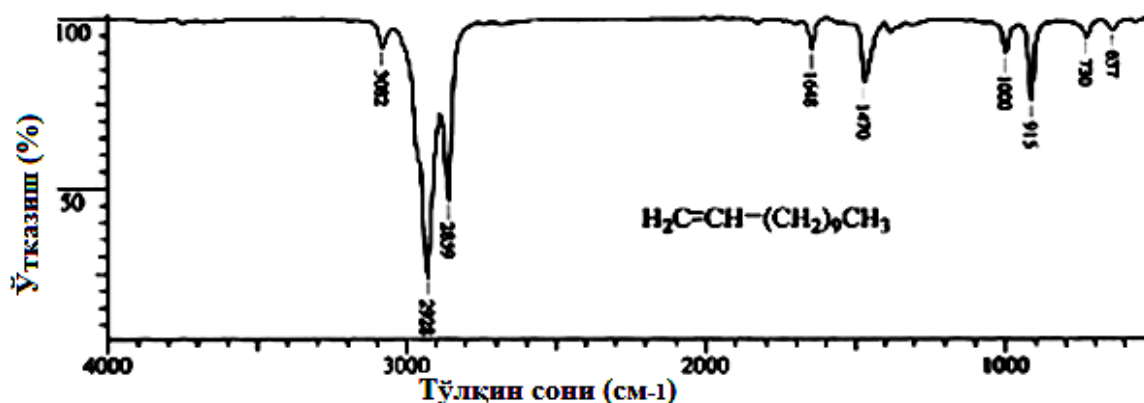
21-расм. Додекан ИҚ -спектри

7-жадвал

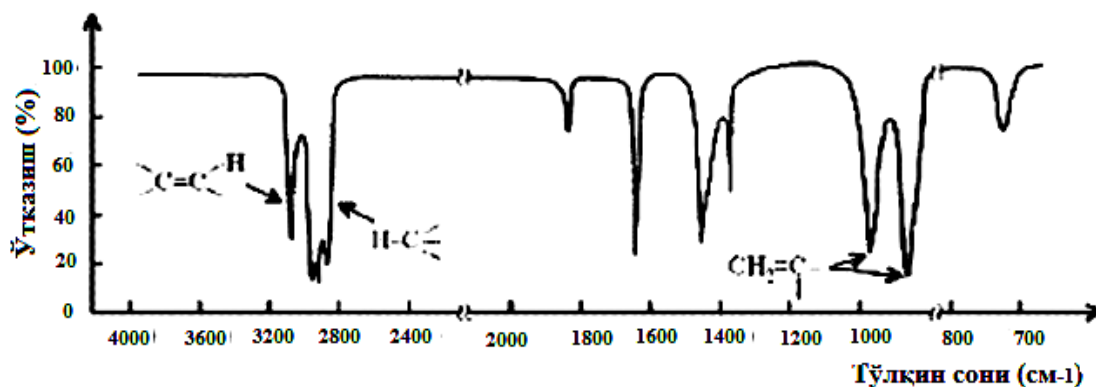
Турли углеводородлар C–H ва C–C боғларининг валент ( $\nu$ ) ва деформацион ( $\delta_s$ ) тебранишлари қийматлари

Боғ турлари	Валент тебранишлар, $\text{см}^{-1}$	Деформацион тебранишлар, $\text{см}^{-1}$
C–H ( $\text{CH}_3$ гуруҳлар)	$\nu_{\text{as}}$ 2962 и $\nu_{\text{s}}$ 2872	$\delta_{\text{s}}$ 1375 и $\delta_{\text{as}}$ 1450
Метилен гуруҳлар $\text{CH}_2$	$\nu_{\text{as}}$ 2962 и $\nu_{\text{s}}$ 2853	Тўртта ичида энг интенсивлиги катгаси $\delta_{\text{s}}$ 1465
=C–H	3010–3095	
C–H	1000–650	
=CHR	3040–3010	
=CH <sub>2</sub>	3095–3075	
C= C	1650	
R–C $\equiv$ C– (ацетиленда ва моноалмашганларда бўлмади)	2260–2100	
–C $\equiv$ C–H	3333–3267	700–610
Бензолдаги C–H	3100 и 3000	Текисликдан ташқарида 900–675 ва текисликда 1300–1000 деформацион тебранишлар обертонлари 2000–1650
Циклнинг (бензол) скелетли тебранишлари	1600–1585 и 1500–1400	

C=C боғлар идентификацияси: барча оддий алкенлар  $1650 \pm 20 \text{ см}^{-1}$  соҳада ютилиш намаён этади (22,23-расмлар). =C–H валент тебранишларнинг частотаси  $3010\text{--}3095 \text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилади,  $\nu\text{=C–H}$  қиймати қўшбоғдаги алмашилиш даражаси билан аниқланади (7-жадвал).



22-расм. Додецен-1 ИҚ-спектри

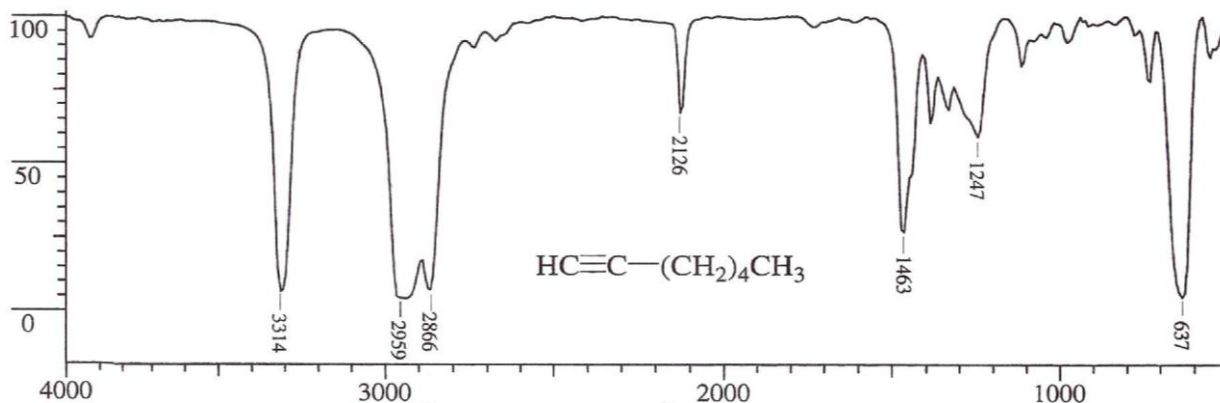


23-расм. Гексен-1 ИҚ-спектри

Алкенлар учун, тебранишларга текисликдан ташқарида бўлган  $1000\text{--}650\text{ см}^{-1}$  соҳадаги С-Н деформацион тебранишлар характерли бўлади.

Ацетилен гуруҳи учун икки турдаги  $\text{C}\equiv\text{C}$  ва С-Н боғларнинг валент тебранишлари характерлидир. Ацетилен ва унинг моноҳосилалари учун С-Н деформацион тебранишларнинг ютилиш чизиқлари ҳам характерли ҳисобланади. 24-расмда гептин-1 ИҚ-спектри келтирилган.

$\text{C}\equiv\text{C}$  боғнинг валент тебранишлари  $2260\text{--}2100\text{ см}^{-1}$  соҳадаги ютилиш чизиқлари кўринишида кузатилади. Ацетилен ва унинг симметрик алмашган ҳосилалари учун  $\text{C}\equiv\text{C}$  валент тебранишлар намоён бўлмайди.

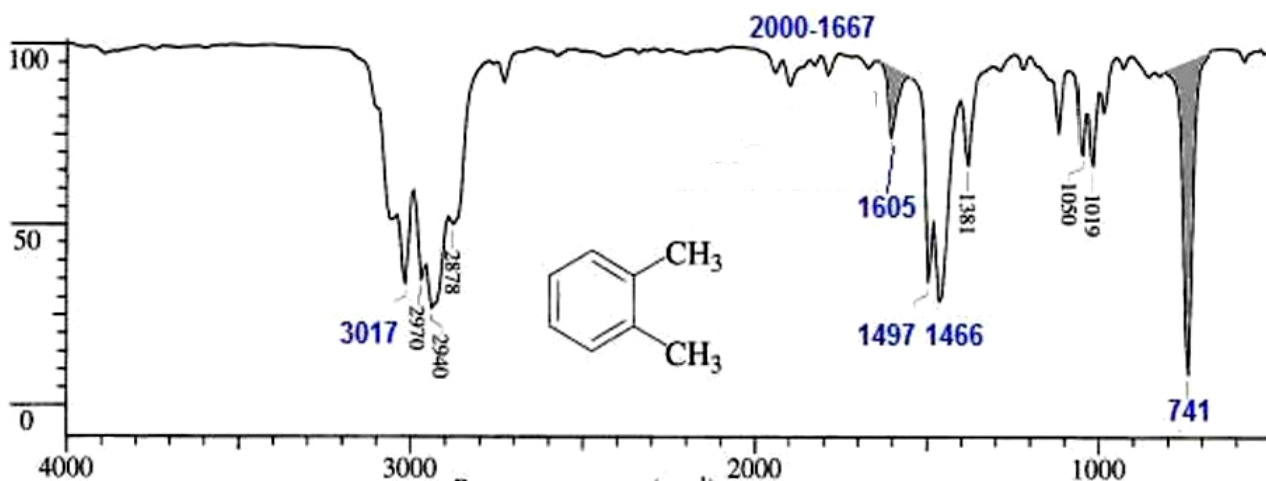


24-расм. Гептин-1 ИҚ-спектри

Моноалмашган алкинларнинг спектрларида С-Н боғларнинг валент тебранишлари  $3333\text{--}3267\text{ см}^{-1}$  соҳада интенсив ютилиш чизиғи кўринишида намоён бўлади.

Терминал алкинлар ва уларнинг моноалмашган ҳосилаларининг С-Н боғларини деформацион тебранишлари  $700\text{--}610\text{ см}^{-1}$  соҳада кенг ютилиш чизиғини беради.

Ароматик бирикмалар. Бензол фрагменти учун боғларнинг тўрт хил тебранишлари хос (25-расм).



25-расм. о-ксилолнинг ИҚ-спектри

C–H боғнинг валент тебранишлари 3100 ва 3000  $\text{см}^{-1}$  соҳада кузатилади. Бу тебранишларнинг чизиқлари ўртача интенсивликка эга ва одатда чизиқлар гуруҳини ташкил қилади.

Текисликдан ташқаридаги халқадаги C–H боғларнинг деформацион тебранишлари 900 – 675  $\text{см}^{-1}$  соҳада кузатилади. Бу ароматик бирикмаларнинг ИҚ-спектрларида энг информатив ютилиш чизиқлари ҳисобланади. Текислик тебранишларининг чизиқлари 1300–1000  $\text{см}^{-1}$  соҳада намоён бўлади. C–H деформацион тебранишларнинг обертонали (V<sub>2</sub>, V<sub>3</sub> поғоналарга ўтишлар, масалан, V<sub>0</sub>→V<sub>2</sub> ўтиш биринчи обертон дейилади) 2000–1650  $\text{см}^{-1}$  интенсивлиги кам бўлган ютилиш чизиқлари кўринишида намоён бўлади (намунанинг концентрацияси одатдагидан 10 марта кичик бўлганда осон кузатилади).

Бу чизиқларнинг кўриниши ароматик халқадаги алмашилиш турини характерлайди. C–C цикли ва скелетли тебранишлар 1600–1585 ва 1500–1400  $\text{см}^{-1}$  соҳада кузатилади. Скелетли тебранишлар чизиқлари халқадаги ўриндошнинг табиатига қараб дублетлар кўринишида намоён бўлиши мумкин.

*Гидроксил гуруҳ.* Органик бирикманинг молекуласига гидроксил гуруҳнинг киритилиши C–O ва O–H боғларнинг тебранишлари билан боғлиқ бўлган ютилиш чизиқларини пайдо бўлишига олиб келади. O–H валент тебранишлари частоталарнинг кенг интервалида (3600–2500  $\text{см}^{-1}$ ) пайдо бўлади, бу гидроксил гуруҳнинг водород боғларни ҳосил қила олиш қобилияти билан боғлиқ. Спиртлар ва фенолларнинг эркин, ассоцирланмаган гидроксил гуруҳи тор ютилиш чизигига эга. Углеводородлар ҳосилаларининг O–H ва C–O боғлари валент ва деформацион тебранишларини йиғма жадвалида ароматик углеводородлар ҳосилаларининг ИҚ-спектрларини идентифицирлаш имконини берадиган маълумотлар берилган (8-жадвал).

8-жавдал

Ароматик углеводородларнинг O–H ва C–O боғларининг валент ва деформацион тебранишлари қийматлари

Боғ турлари	Валент тебранишлар, $\text{см}^{-1}$	Деформацион тебранишлар, $\text{см}^{-1}$
-------------	--------------------------------------	---

$-\text{OH}_{\text{ассоц}}$ , фенол	3244	Текисликдаги 1378 Текисликдан ташқарида 650
$\text{C}-\text{H}_{\text{аромат}}$ , фенол	3052	Обертонлар 2000–1667 Текисликдан ташқарида 815, 753
$\text{C}-\text{C}_{\text{аромат}}$ , фенол	1601, 1501, 1478	Текисликдан ташқарида 669
$\text{C}-\text{O}_{\text{фенол}}$	1231	
$\text{O}-\text{H}_{\text{ассоц}}$ , бензил спиртида	3329	1209
$\text{C}-\text{H}_{\text{аромат}}$ , бензил спиртида	3100–3000	
$\text{CH}_2$ бензил спиртида	2940–2860 $\text{CH}_2$ (углерод $\text{sp}^2$ -гибридланиш ҳолатида)	
$\text{C}-\text{C}$ бензил спиртидаги халқалар	1501, 1455, 1471	
$\text{OH}_{\text{св}}$ , гексанол-2	3600 (в $\text{CCl}_4$ )	
$\text{OH}_{\text{ассоц}}$ , гексанол-2	3300 <sub>шир</sub>	
$\text{C}-\text{O}$ , спирт	1200–1000	1450–1250; 750–650
$\text{C}-\text{O}_{\text{бирламчи}}$	1075–1000	
$\text{C}-\text{O}_{\text{иккиламчи}}$	1125–1000	
$\text{C}-\text{O}_{\text{учламчи}}$	1210–1100	

*Карбонил гуруҳ.* Альдегид ва кетонлардаги  $\text{C}=\text{O}$  боғнинг валент тебранишлари  $1870\text{--}1540\text{ см}^{-1}$  соҳадаги интенсив ютилиш чизиқлари билан характерланади.

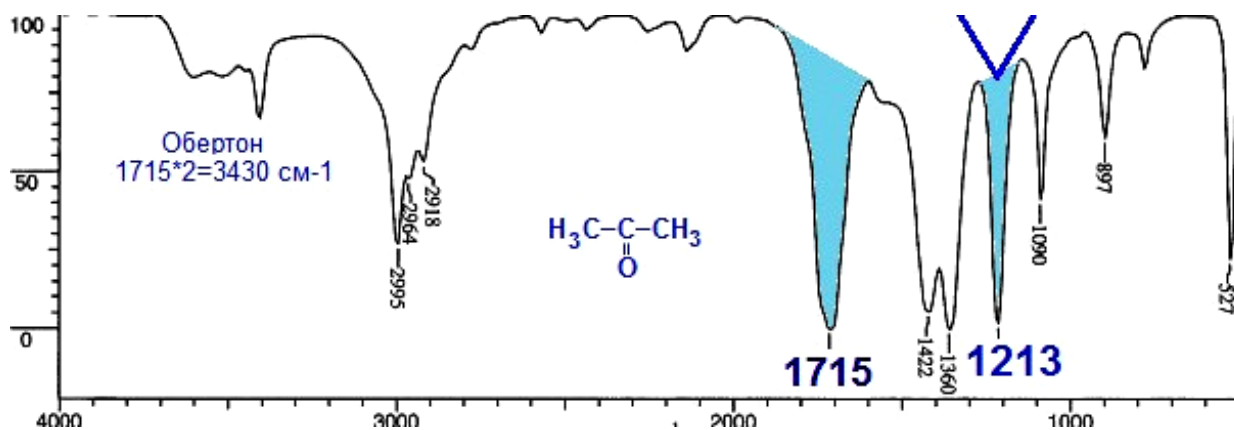
$\text{C}=\text{O}$  гуруҳнинг валент тебранишларининг чизиқларини ҳолати кўпгина омиллар билан аниқланади, буларга: физик ҳолати, электрон таъсири ва қўшни ўриндошлар массаларининг таъсири, тутатиш, водород боғлар мисол бўлади. Карбонил гуруҳларнинг валент ва деформацион тебранишлари 9-жадвалда келтирилган.

Карбонил гуруҳларнинг валент ва деформацион тебранишлари қийматлари

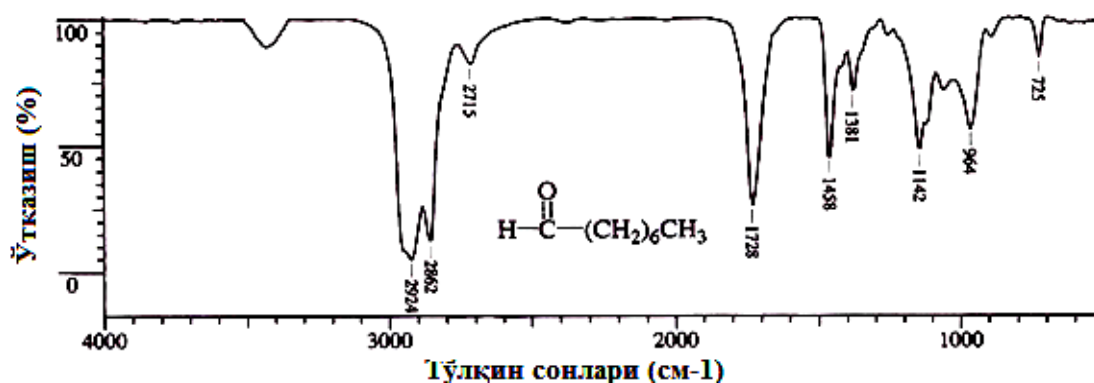
Боғланиш турлари	Валент тебранишлар, $\text{см}^{-1}$	Деформацион тебранишлар, $\text{см}^{-1}$
метил гуруҳдаги C–H, ацетон	$\nu_{\text{as}}$ 2995 $\nu_{\text{s}}$ 2918	$\delta_{\text{as}}$ 1422 $\delta_{\text{s}}$ 1360
C=O, ацетон	1715	
C–CO–C, ацетон	1213	
RCHO даги C–H		975–780
C–H алифатик альдегидлар	2830–2810, кучсиз; 2720–2690, кучсиз	
C–H ароматик альдегидлар	2830–2810; 2750–2720	
C=O, алифатик альдегидларда	1740–1720	
C=O, ароматик альдегидларда, $\alpha, \beta$ - тўйинмаган	1710–1685	
C–H ароматик альдегидлар	2830–2810; 2750–2720	
C=O, алифатик кетонларда	1725–1705	
C=O, кетонларда	1710–1685	
RCOAr да C=O	1690 га яқин	

Очиқ занжирли кетонларда карбонил гуруҳнинг тебранишларига мос келадиган ютилиш частотаси  $1725\text{--}1705\text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилади.

Альдегидларда карбонил гуруҳнинг валент тебранишлари ҳисобига намоён бўладиган ютилиш, тегишли метилкетонларга нисбатан юқорирак частоталарда кузатилади (26, 27- расмлар).



26-расм. Ацетон ИҚ-спектри



27-расм. Октаналь ИҚ-спектри

*Карбоксил гуруҳ.* Карбоксил гуруҳ ИҚ-спектрда О–Н боғнинг валент ва деформацион тебранишлари, С=О боғнинг валент тебранишлари ва С–О боғнинг деформацион тебранишлари бўйича аниқланади.

Карбон кислоталар водород боғлар ҳисобига ассоцияланганлиги сабабли асосан димерлар кўринишида бўлади. Шу сабабли эркин гидроксил гуруҳнинг (тахминан 3520  $\text{см}^{-1}$ ) валент тебранишлари кутбсиз эритувчилардаги суюлтирилган эритмаларда ёки газ фазасида кузатилади.

Алифатик карбон кислотанинг спектри 28-расмда келтирилган.



28-расм. Гексан кислотасининг ИҚ-спектри

Карбоксил гуруҳнинг С=О валент тебранишларининг чизиқлари, кетон карбонилларининг тебранишларидан интенсивроқ.  $\alpha$ - ҳолатдаги электроноакцептор гуруҳлар С=О ютилиш частотасини (10–20  $\text{см}^{-1}$ га) ортишига сабаб бўлади. Қуйидаги жадвалда карбоксил гуруҳларнинг валент ва деформацион тебранишлари келтирилган (10-жадвал).

**10 -жадвал**

*Карбоксил гуруҳларнинг валент ва деформацион тебранишлари қийматлари*

Боғланиш турлари	Валент тебранишлар, $\text{см}^{-1}$	Деформацион тебранишлар, $\text{см}^{-1}$
С=О, алифатик тўйинган кислоталар, мономерлар	1760	
С=О <sub>ассоц</sub> , алифатик тўйинган кислоталар	1720–1706	

C=O, алифатик тўйинмаган кислотлар	1710–1680	
C–O		1320–1210 интенсив
C–OH		1440–1396 ўртача интенсив
O–H димерлар	3300–2500 маркази 3000 яқинида	Текселикдан ташқарида, 920

*Карбоксилат-анион.* Карбоксилат-ион иккита: 1650–1550  $\text{см}^{-1}$  соҳада асимметрик валент тебранишларни ва 1400  $\text{см}^{-1}$  яқинидаги симметрик валент тебранишларнинг кучсиз чизиғини ҳосил қилади. O–H валент тебранишларининг чизиғи йўқ. Қуйидаги жадвалда карбон кислоталар ҳосилаларининг валент ва деформацион тебранишлари қийматлари келтирилган.

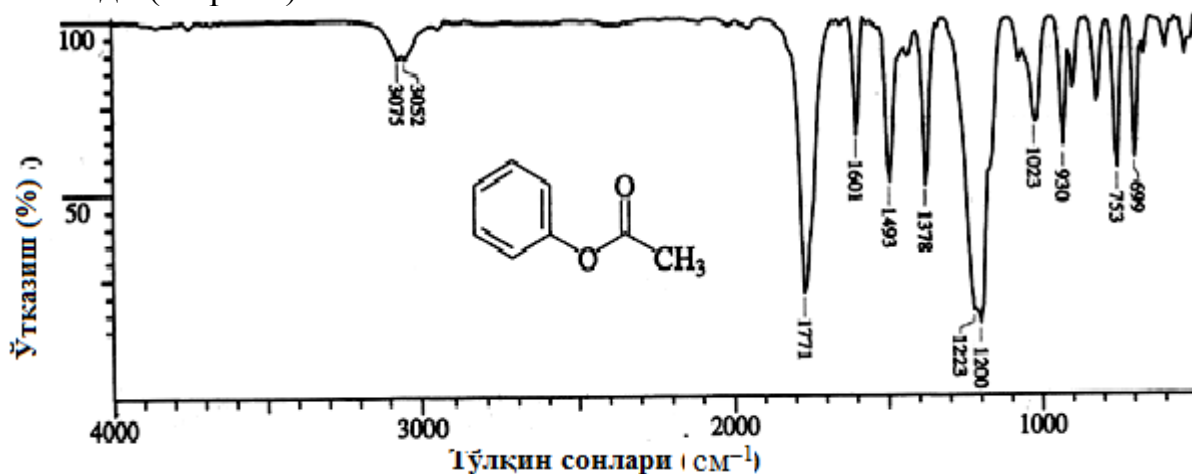
**11-жадвал**

*Карбон кислоталар ҳосилаларининг ИҚ-спектрларида валент ва деформацион тебранишлари қийматлари*

Боғланиш турлари	Валент тебранишлар, $\text{см}^{-1}$	Деформацион тебранишлар, $\text{см}^{-1}$
C–H ароматик	3075, 3052	
	1771	
C–C халқалар	1601	
CH <sub>3</sub>		$\delta_{\text{as}}$ 1493
		$\delta_{\text{s}}$ 1378
C(=O)–O ацетат гуруҳида	1200	
C=O алифатик мураккаб эфирлари (формиатлардан ташқари)	1750–1735	
C=O формиатлар, $\alpha, \beta$ -тўйинмаган мураккаб эфирлар ва бензоатлар	1730-1715	
C=O галогенангидрид гуруҳда: Cl, Br, F	1815–1785; 1812; 1869	
C–H бензой ангидридида; C=O; C–CO–O–CO–C	3067, 3013; 1779, 1717; 1046	
C=O акриламидда	1679	1617
NH акриламидда	3352 асимметрик 3198 симметрик	700–600 текисликдан ташқарида

C–N акриламидда	1432	
N=O нитробирикмаларда		

*Мураккаб эфир гуруҳи.* Мураккаб эфирларнинг ИҚ-спектрларида иккита кучли ютилиш чизиклари кузатилади, улар C=O ва C–O валент тебранишларига мос келади (29-расм).



29-расм. Фенилацетат ИҚ-спектри

Нормал тузилишли мураккаб эфир гуруҳининг валент тебранишлари частотаси, фенол фрагментининг кислород атоми билан туташган ҳолда юқорироқ бўлишига, арил ёки бошқа тўйинмаган гуруҳнинг карбонил гуруҳи билан туташган ҳолда эса C=O валент тебранишларининг частотасини пасайишига сабабчи бўлади.

Электроноекцептор гуруҳлар C=O валент тебранишларининг ютилиш частотасини оширади, масалан: винулацетат –  $1776\text{ см}^{-1}$ , фенилацетат –  $1771\text{ см}^{-1}$ ; учхлорсирка кислотасининг этил эфири –  $1770\text{ см}^{-1}$  мисол бўлиши мумкин. Мураккаб эфирлардаги C–O боғининг валент тебранишлари иккита ўзаро (шулардан C–C(=O)–O ва O–C–C) таъсирлашадиган асимметрик тебранишлардан ташкил топган бўлиб, биринчиси анча муҳим ҳисобланади.

Бу чизиклар  $1300\text{--}1000\text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилади (“эфир чизиклари”).

Кетонлар таркибида учрайдиган карбонил гуруҳларининг карбоксил гуруҳларидан фарқи қуйидаги 12-жадвалда келтирилган.

### 12-жадвал

#### Кетонларнинг карбоксил ва карбонил гуруҳлари ИҚ-спектрлари

Мезонлар	Мураккаб эфирлар	Кетонлар	Карбон кислоталар
$\nu$ (C–O) интенсивлигига кўра	Кетонлардаги $\nu$ (C=O) дан катта	$\nu$ (C=O) интенсивлиги кам	$\nu$ (C=O)
Боғнинг валент ва деформацион тебранишлари	-	-	мавжуд

чизиқлари O–H			
---------------	--	--	--

*Аминогуруҳ.* Аминогуруҳ махсус ютилиш чизиқлари билан характерланади, улар валент (13-жадвал) ва деформацион (14-жадвал) тебранишлар туфайли юзага келади.

**13-жадвал**

*Алифатик ва ароматик аминларнинг ИҚ-спектрларида NH-гуруҳлар валент ва деформацион тебранишлари*

<b>NH Валент тебранишлари, см<sup>-1</sup></b>			
Бирламчи аминлар R–NH <sub>2</sub>	3500-3300	кучсиз	Иккита чизиқ $\nu_{as}, \nu_s$
Иккиламчи аминлар R <sub>2</sub> N–H	3500-3300	кучсиз	Чизиқ $\nu_{N-H}$
Ассоцирланган гуруҳ N–H	3400-3100	ўртача	
<b>Деформацион тебранишлар, см<sup>-1</sup></b>			
Бирламчи аминлар R–NH <sub>2</sub>	1650-1560 900-650	ўртача	Текис деформацион тебранишлар Нотекис деформацион тебранишлар, кенг чизиқ
Иккиламчи аминлар R <sub>2</sub> N–H	1650-1550	кучсиз	Чизиқ холати ассоциацияланиш даражасига боғлиқ
<b>Бошқа тебранишлар</b>			
Алифатик аминлар	1220-1020	кучсиз, ўртача	
Ароматик аминлар: бирламчи иккиламчи учламчи	1340-1250 1350-1280 1360-1310	кучли	

**14-жадвал**

*Таркибида азот тутган органик бирикмаларнинг ИҚ-спектрларидаги валент ва деформацион тебранишлар қиймати.*

<b>Боғланиш турлари</b>	<b>Валент тебранишлар, см<sup>-1</sup></b>	<b>Деформацион тебранишлар, см<sup>-1</sup></b>
N–H	3368 <sub>ассим</sub> , 3291 <sub>сим</sub> , («арчасимон» 320 га яқин)	1601
C–H	2928, 2859	$\delta_s$ CH <sub>2</sub> (қайчисимон): 1470

C–N	1069	
$\alpha$ -метилбензилцианиддаги C $\equiv$ N	2260–2240 электронноакцептор ўриндошлар ютилиш частотасини 2240–2222 гача пасайтиради	
$\alpha$ -метилбензил- цианиддаги C–N	3067, 3030; Алифатик бирикмаларда 2990, 2944	761 текисликдан ташқарида
азобирикмалардаги –N=N–	1429	
Нитробирикмалардаги –NO <sub>2</sub>	1661–1499 <sub>асим.</sub> 1389–1259 <sub>сим.</sub>	

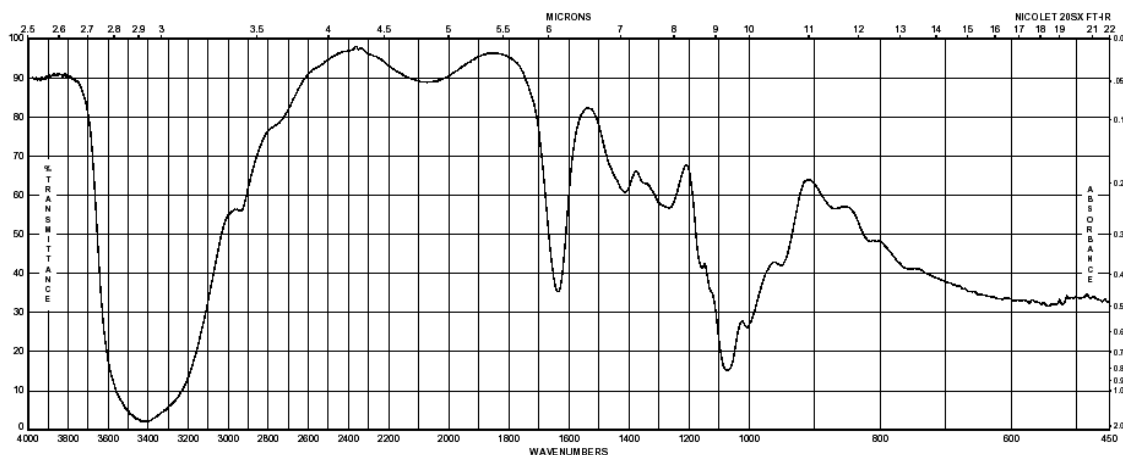
**Олтингугурт тутган органик бирикмалар.** Тиол гуруҳи S–H 2600–2550 см<sup>-1</sup> соҳадаги валент тебранишлар ҳисобига ютилиш чизиғи билан характерланади. Интенсивлиги кичик бўлса-да, S–H чизиғи осон идентификацияланади, чунки бу соҳага бошқа гуруҳларни ютилиш чизиқлари деярли тушмайди. C–S боғга тегишли бўлган валент тебранишларнинг ютилиш чизиқлари 700–600 см<sup>-1</sup> соҳада кузатилади. Бу чизиқларнинг интенсивлиги кичик бўлгани ва ҳолати ўзгариб тургани учун структуравий анализда кам ва ноаниқ маълумот беради. Алифатик C–H боғлар учун валент тебранишлар 2936 см<sup>-1</sup>; S–H валент тебранишнинг кучсиз чизиғи 2558 см<sup>-1</sup>; C–S валент тебранишлари 730 см<sup>-1</sup> соҳада намоён бўлади. Сульфоксидларда S=O боғнинг валент тебранишлари чизиғи интенсив ва 1070–1030 см<sup>-1</sup> соҳада кузатилади. Моддалар таркибидаги водород боғнинг ҳосил бўлиши ютилиш чизиғини пастки частоталар томонга силжишига олиб келади. S=O тебранишларнинг частотаси сульфоксид молекуласига электронноакцептор ўриндошнинг киритилиши натижасида ортади.

Сульфонилхлоридлар 1410–1380 см<sup>-1</sup> ( $\nu_{as}$  S=O) ва 1204–1177 см<sup>-1</sup> ( $\nu_s$  S=O) соҳада ютади.

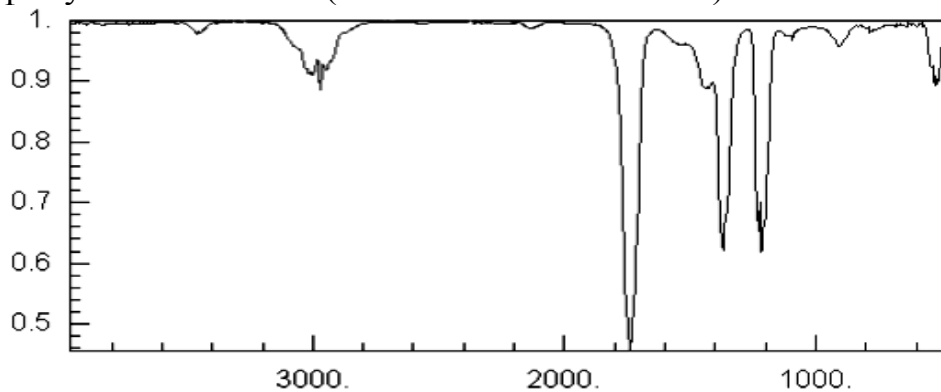
Сульфонамидлар 1370–1335 см<sup>-1</sup> ( $\nu_{as}$  S=O) ва 1170–1155 см<sup>-1</sup> ( $\nu_s$  S=O) интервалида ютади. Сульфокислоталар 1350–1342 см<sup>-1</sup> ( $\nu_{as}$  S=O) ва 1165–1150 см<sup>-1</sup> ( $\nu_s$  S=O) ютади.

## Назорат саволлари

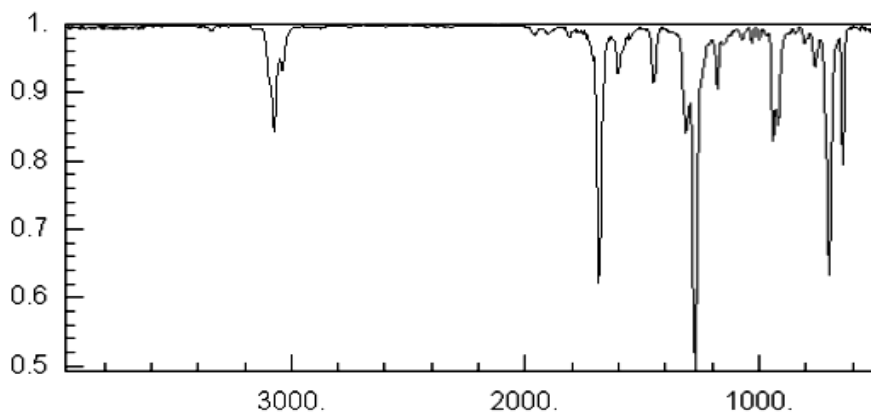
1. Гексен-1 ёки гексаннинг ИҚ-спектрлари 3400да кенг чизик намоён қилади ва 1640 ва 1080  $\text{cm}^{-1}$  максимумлар пайдо қилади (тўғри жавобни асосланг).



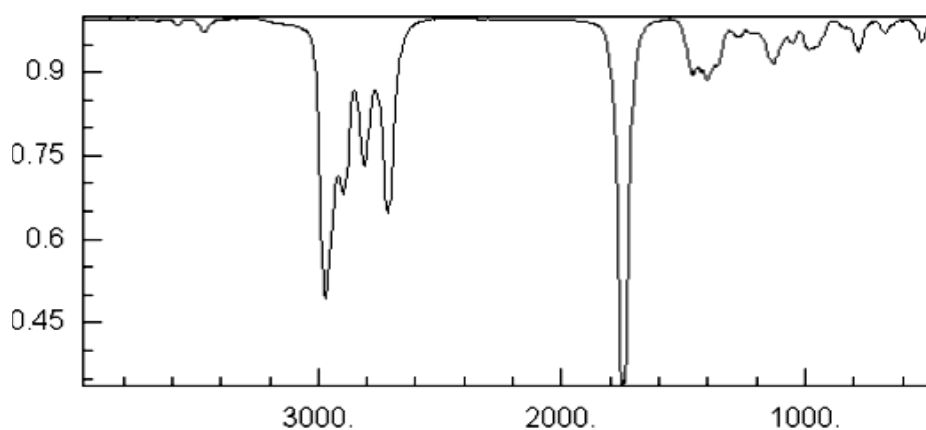
2. ИҚ-спектр формуласи  $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$  бўлган бирикмага тегишли, унинг структура формуласини топинг (жавобингизни асосланг).



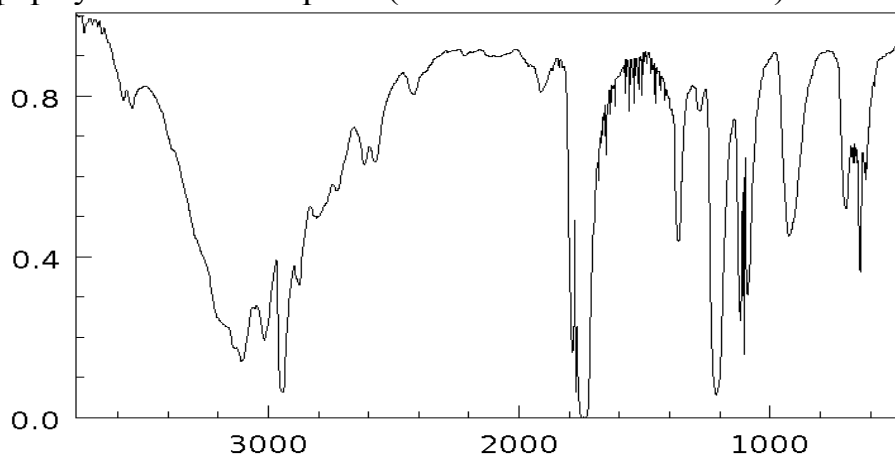
3. ИҚ-спектр соф ароматик кетонга тегишли, унинг структура формуласини топинг ва жавобни асосланг.



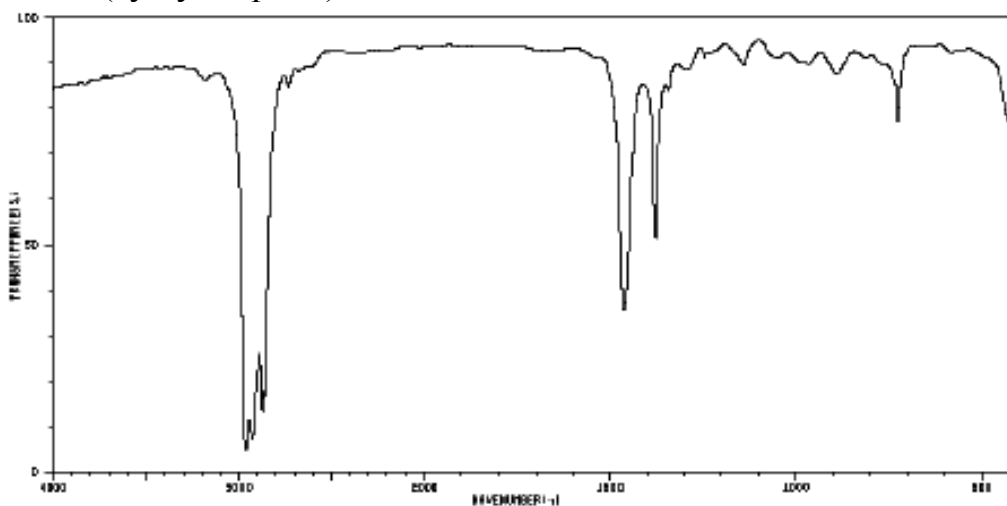
4. ИҚ-спектр формуласи  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$  бўлган бирикмага тегишли, унинг структура формуласини топинг (жавобингизни асосланг).



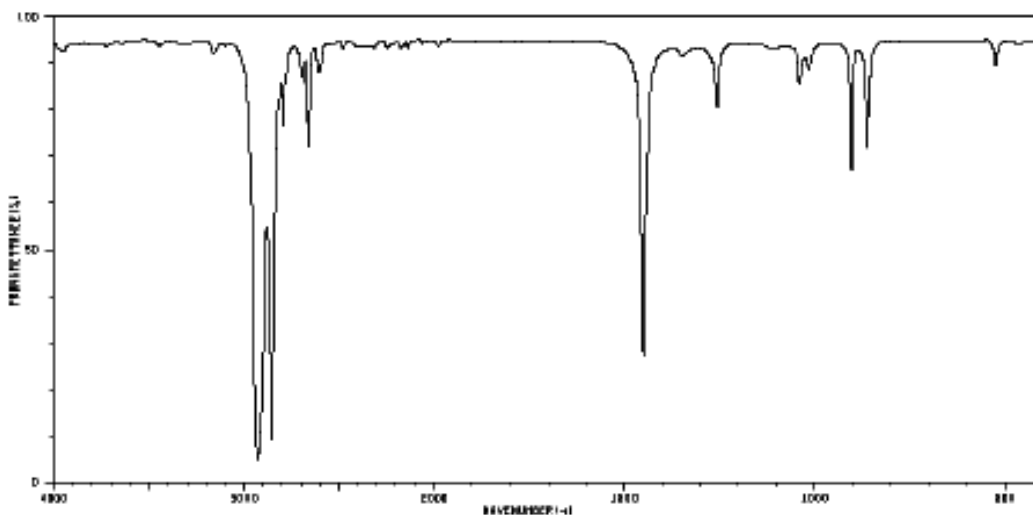
5. ИҚ-спектр формуласи  $\text{CH}_2\text{O}_2$  бўлган бирикмага тегишли, унинг структура формуласини келтиринг (жавобингизни асосланг).



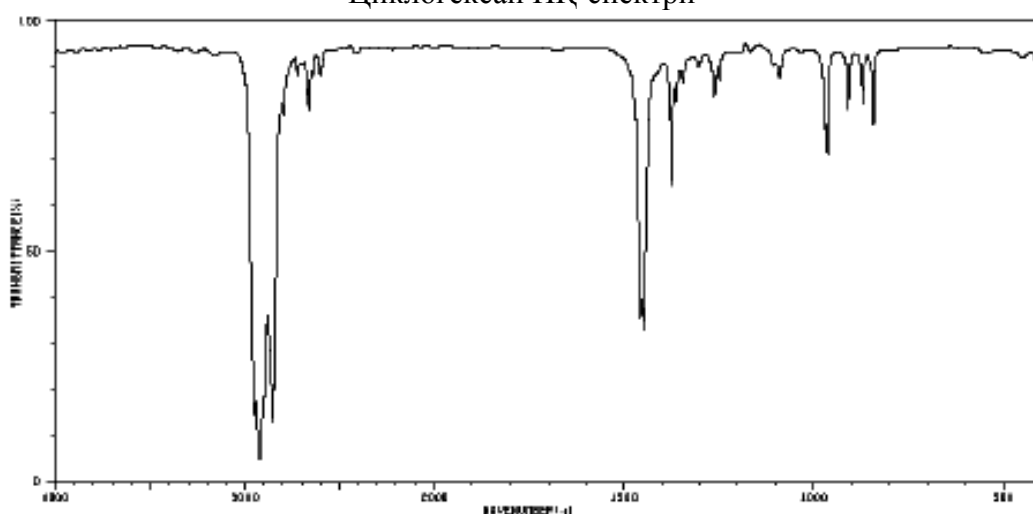
6. C–H боғнинг валент тебранишлари  $\dots \text{cm}^{-1}$  соҳада гексан ва метилциклогексан спектрларида кузатилади, лекин циклогексан спектрида кузатилмайди (тушунтиринг).



н-гексан ИҚ-спектри

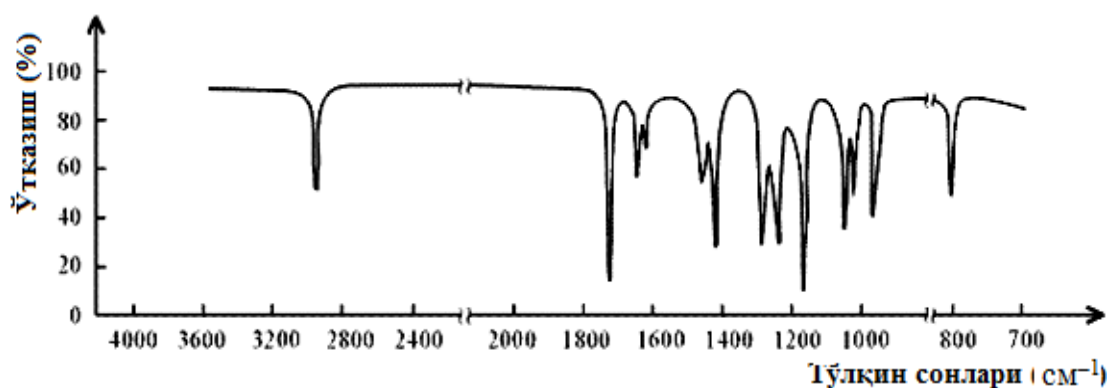


Циклогексан ИҚ-спектри



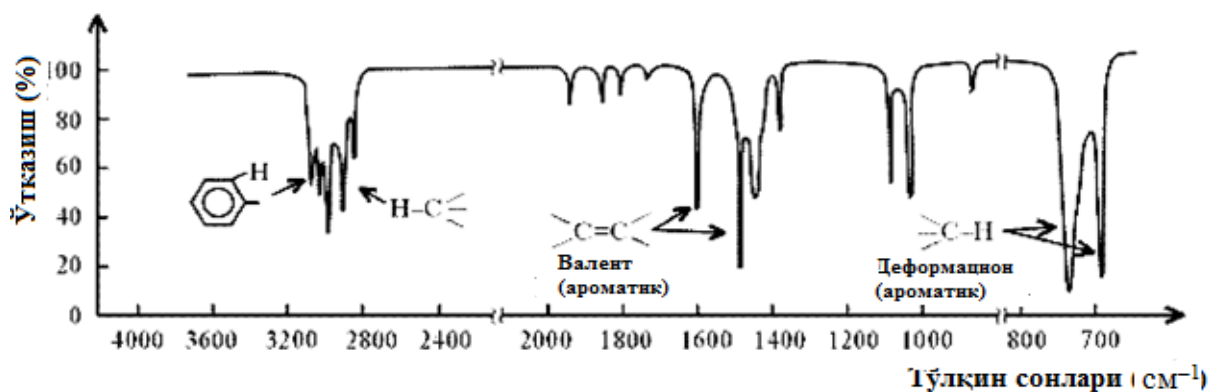
Метилциклогексан ИҚ-спектри

7. Қуйида ИҚ-спектри берилган  $C_5H_8O_2$  таркибли бирикманинг тузилиши бўйича фикрингизни айтинг

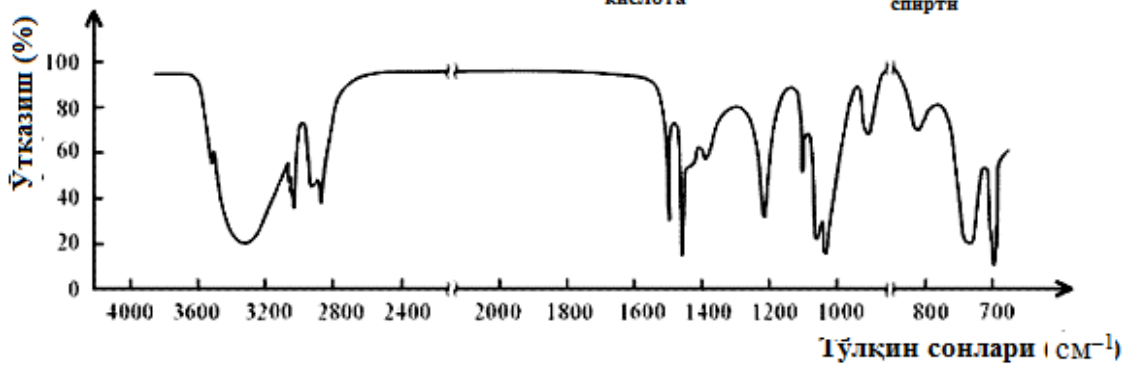
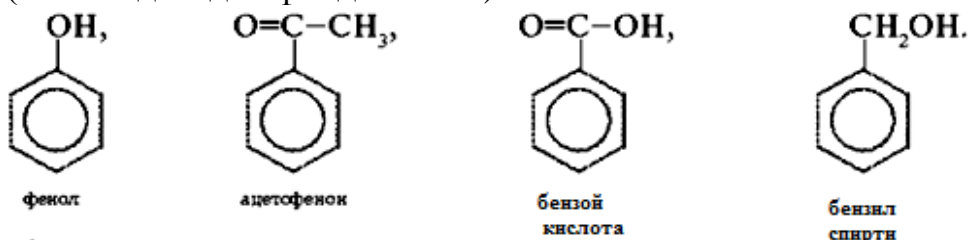


8. Бирламчи ароматик аминни алифатик аминдан ..... чизиқ холатига қараб фарқлаш мумкин.

9. ИҚ-спектр ..... га мансуб ( 7-жадвал).



10. Қуйидаги ИҚ-спектр келтирилган бирикмалардан қайси бирига тегишли (8-11 жадвалдан фойдаланинг)?



## Талабалар билимини назорат қилиш учун савол ва масалалар

### 1. Электрон спектроскопия

1.1. УБ спектроскопия назарияси, жихозлари, тажриба эксперименти

1.1.1. Электрон спектрофотометр блок-схемаси

1.1.2. Электрон спектрофотометр монохроматорларининг турлари.

1.1.3. Электрон спектрофотометрнинг нурланиш манбалари.

1.1.4. Электрон спектрнинг нурланиши учун модданинг фазовий ҳолати.

1.1.5. Электрон спектроскопияда қўлланиладиган эритувчиларга қўйиладиган талаблар.

1.1.6. Ютилиш ва нурланишнинг электрон спектрларининг табиати.

1.1.7. УБ-спектрларда органик моддаларнинг асосий характеристикалари.

1.1.8. Электрон ўтишларнинг синфланиши.

1.1.9. Алканларнинг ютилиш спектрлари.

1.1.10. Алкенларнинг ютилиш спектрлари.

1.1.11. Алкинларнинг ютилиш спектрлари.

1.1.12. Ароматик углеводородларнинг ютилиш спектрлари.

1.1.13.  $n \rightarrow \pi$  ўтишларга эга бўлган гетероатомли бирикмаларнинг ютилиш спектрлари .

1.1.14. Электронодонор ва электроноакцептор ўриндошлар тутган органик бирикмаларнинг спектрлари.

1.1.15. Алмашган бензоллар ютилиш чизиқларини бензол халқасининг қўзғалган чизиқлари сифатида қараш.

1.1.16. Алмашган бензоллар ютилиш чизиқларини ўрганаётган вақтда ўриндошлар билан фенил халқаси ўртасида зарядни кўчиб ўтиши нуқтаи назаридан қараш.

1.2. Электрон микроскопиядан фойдаланиш

1.2.1. Бир-, икки-, уч- ва бошқа кўпкомпонентли системалар анализи учун электрон спектрлардан фойдаланиш.

1.2.2. Ионланиш константаларини аниқлаш учун электрон спектрларидан фойдаланиш (кислоталик ва асослик константалари).

1.2.3. Электрон спектрларда изосбестик нуқталар ва уларнинг аралашмаларни аниқлашда қўлланилиши.

1.2.4. Ютилишнинг электрон спектрларида водород боғларнинг намоён бўлиши ва молекуляр комплексларнинг ҳосил бўлиши.

1.2.5. Комплекслар мувозанат константаларини аниқлаш усуллари.

1.2.6. Турли стехиометрик таркибга эга бўлган комплекслар таркибини аниқлаш учун электрон спектрлардан фойдаланиш.

1.2.7. Реакцияларда интермедиатларнинг электрон спектрларини ўрганиш.

1.2.8. Ютилишда эритувчиларни сольватацион жараёнларга таъсирини ўрганиш.

1.2.9. Қутбли ва қутбсиз эритувчиларни алканларнинг электрон спектрларига таъсири.

1.2.10. Алкенларнинг электрон спектрларига турли қутблиликка эга бўлган эритувчиларнинг таъсири.

1.2.11. Алкинларнинг электрон спектрларига турли қутблиликка эга бўлган эритувчиларнинг таъсири.

1.2.12. Ароматик углеводородларнинг электрон спектрларига турли қутблиликка эга бўлган эритувчиларнинг таъсири.

1.2.13. Бугер-Ламберт-Бер қонуни. Уни бажариш шартлари ва қонундан четланишларнинг табиати.

1.2.14. Флуоресценциянинг қўлланилиш соҳалари.

1.2.15. Фосфоресценциянинг қўлланилиш соҳалари.

1.2.16. Хромофорлар ва ауксохромлар. Бу терминлардан органик моддаларни ютиш қобилиятини тушунтиришда фойдаланиш.

## 2. Тебранма спектроскопия

2.1. ИҚ- ва КР (комбинацион сочилиш) спектроскопия қурилмалари, эксперимент техникаси, назарияси.

2.1.1. ИҚ-спектрометр блок-схемаси.

2.1.2. КР-спектрометр блок-схемаси.

2.1.3. ИҚ соҳада спектрларни ўрганиш учун спектрометрларда қўлланиладигн монохроматорларнинг турлари.

2.1.4. Инфрақизил спектрометрларнинг нурланиш манбалари.

2.1.5. ИҚ-спектрларнинг ютилиш чизиқлари табиати.

2.1.6. Комбинацион сочилиш спектрлари нурланиш чизиқларининг табиати.

2.1.7. Тебранма спектроскопияда Фурье-ўзгаришлари техникаси.

2.1.8. ИҚ- ва КС-спектроскопиясида чизиқларни танлаш қоидалари.

2.1.9. Бузилган тўлиқ ички акс этиш усули.

2.1.10. Тебранма спектрларни ҳисоблаш. Молекуляр механика ҳисоби. Афзалликлари ва камчиликлари.

2.1.11. Тебранма спектрларни ҳисоблаш. Гармоник осциллятор усули. Ангармоник тебранишлар билан боғлиқ хатоликлар.

2.1.12. Тебранма спектрларни ҳисоблаш. Тебранма спектрлар ҳисобида координаталар системаси – декарт ва нормал координаталар.

2.1.13. Тебранма спектрларни ҳисоблаш. Турли амплитудали тебранишларда ҳисобларни бажариш.

2.1.14. Тўғри тебранма масалани ҳисоблаш.

2.1.15. Тесқари тебранма масалани ҳисоблаш.

2.1.16. Нормал тебранишларнинг шакли, характеристикаси. Бу параметрлар нимани характерлайди?

2.2.1. Органик кимёда амалий масалаларни ечиш учун тебранма спектрлардан фойдаланиш.

2.2.2. Тўйинган углеводородларнинг тебранма спектрлари. Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.3. Тўйинмаган углеводородларнинг тебранма спектрлари. Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.4. Ацетилен углеводородларнинг тебранма спектрлари. Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.5. Ароматик углеводородларнинг тебранма спектрлари. Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.6. Карбонил гуруҳ тутган органик бирикмаларнинг тебранма спектрлари (альдегидлар, кетонлар, карбон кислоталар). Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.7. Карбонил гуруҳ тутган органик бирикмаларни тебранма спектрлари (карбон кислоталарнинг ҳосилалари – эфирлар, амидлар, ангидридлар). Бу тебранишларнинг шакли ва характеристиклиги.

2.2.8. Атом массалари ва молекула геометриясининг тебранма спектрларга таъсири.

2.2.9. X–Н боғларнинг валент тебранишлари (X – азот, кислород, олтингугурт, фосфор).

2.2.10. Тебранма спектрларда водород боғларнинг намоён бўлиши.

2.2.11. Бугер–Ламберт–Бер қонуни. Уни бажариш шартлари ва қонундан четланиш табиати.

2.2.12. Максимумли интенсивлик, интеграл интенсивлик. Аниқлаш усуллари.

2.2.13. ИҚ-спектрларнинг чизиқлари интенсивлигини баҳолашнинг ярим миқдорий усуллари.

2.2.14. Қаттиқ органик бирикмалар тебранма спектрларининг ўзига хослиги.

2.2.15. Суюқ органик бирикмалар тебранма спектрларининг ўзига хослиги.

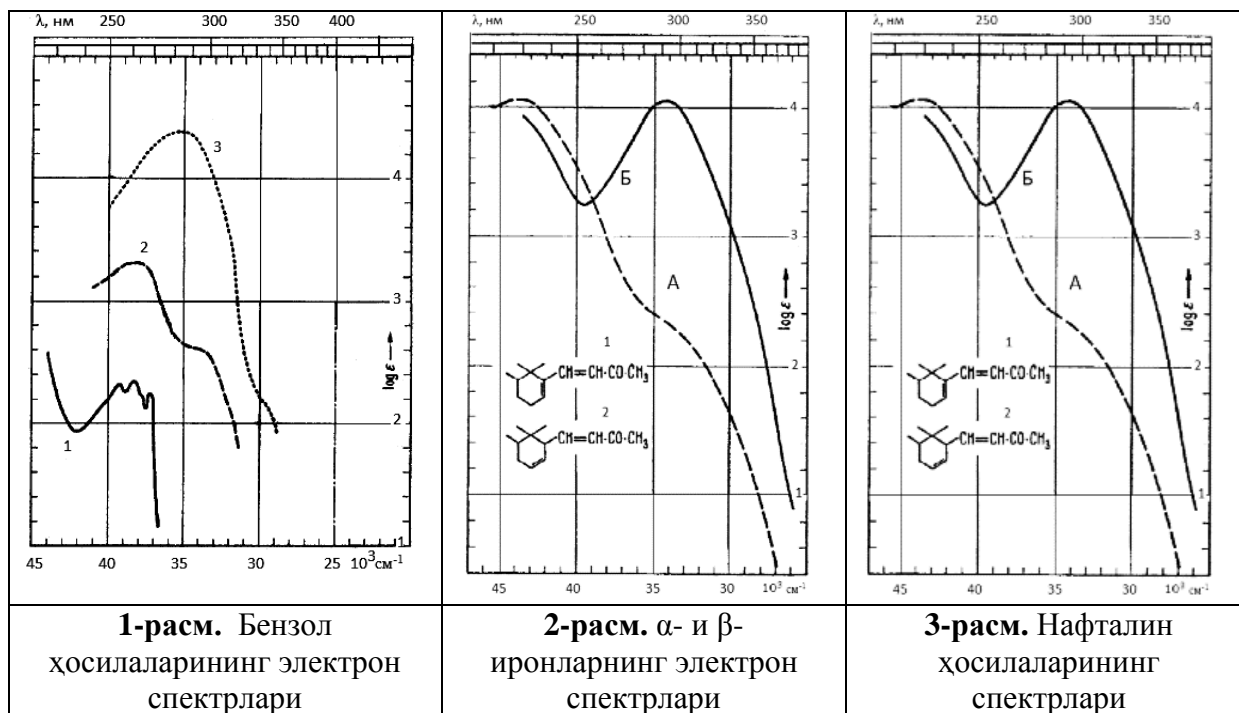
2.2.16. Органик бирикмаларнинг газ фазадаги тебранма спектрларининг ўзига хослиги.

### **3. Бирикма тузилишини унинг УБ-спектри билан солиштириш**

3.1. 1-расмда аллилбензол ( $C_6H_5-CH_2-CH=CH_2$ ), 1-фенилпропен-1 ( $C_6H_5-CH=CH-CH_3$ ), ва 1-фенилпентадиен-1,3 ( $C_6H_5-CH=CH-CH=CH_2-CH_3$ ) спектрлари келтирилган. Электрон спектрдаги ҳар бир ютилиш эгриси қайси бирикмага тегишли?

3.2. 2-расмда берилган эгрилардан қайси бири – А ёки Б  $\alpha$ -ирон (I, 5-метил- $\alpha$ -ионон) ва  $\beta$ -ирон (II, 5-метил- $\beta$ -ионон)га тегишли?

3.3. 3-расмда 2-нафтол ва 2-нафтилкарбинол спектрлари келтирилган. Ҳар бир эгри қайси бирикмага тегишли?



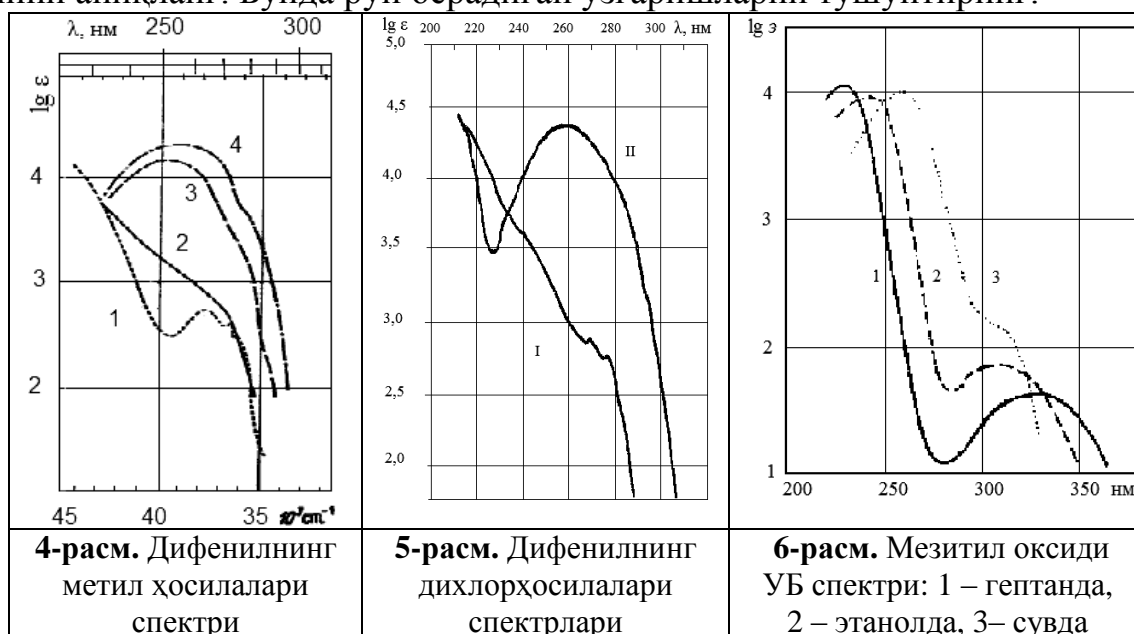
3.4. Қуйидаги моддалар учун келтирилган спектрлардаги фарқни тушунтиринг: I – 2,2'-диметилдифенил, II – 3,3'-диметилдифенил, III – 4,4'-диметилдифенил, IV – 2,2',3,3',4,4'-гексаметилдифенил (4-расм).

3.5. 5-расмда 2,2'-дихлордифенил ва 4,4'-дихлордифенил спектрлари келтирилган. Ҳар бир эгри қайси бирикмага хос эканини топинг.

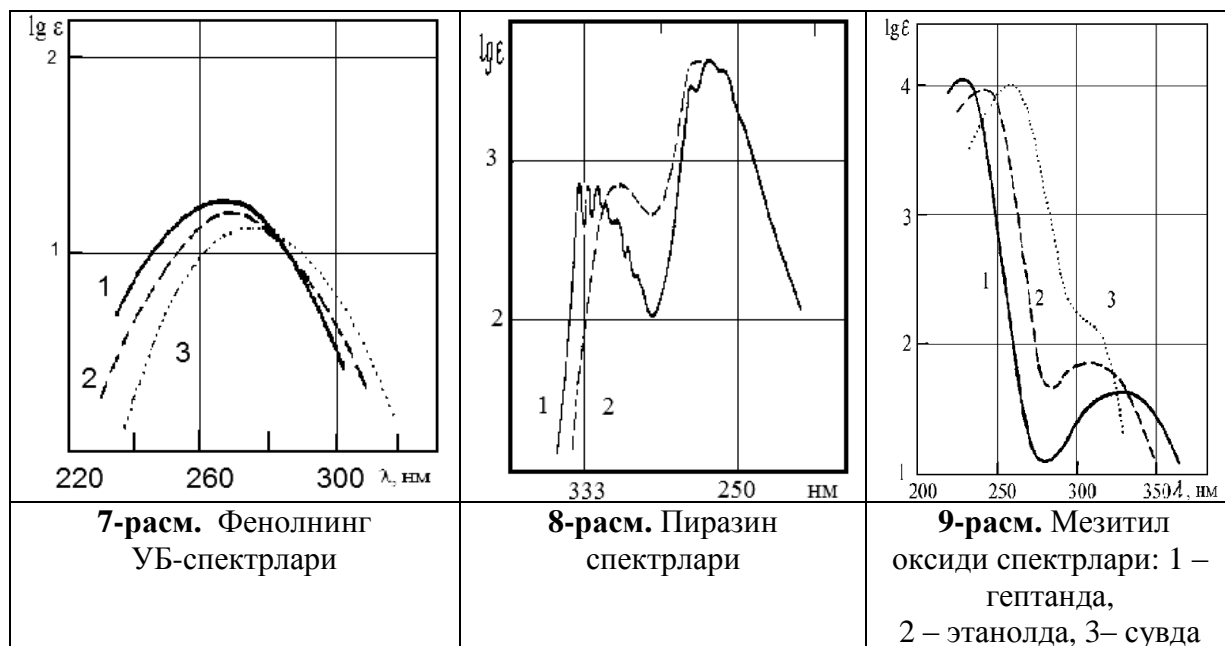
3.6. 6-расмда фенолни н-гександаги, спиртдаги ва сувли эритмадаги ютилиш спектрлари келтирилган. Ҳар бир эгри қайси эритувчига хослигини топинг.

3.7. Ацетон спектри (7-расм) н-гексан, этанол ва сувда олинган. Ҳар бир эгри қайси эритувчига хослигини топинг.

3.8. Пиразин (1,4-диазин) спектри эритувчининг кутблилигига қараб ўзгаради (8-расм). Қайси спектр сувдаги ва циклогександаги эритмага тегишли эканини аниқланг. Бунда рўй берадиган ўзгаришларни тушунтиринг.



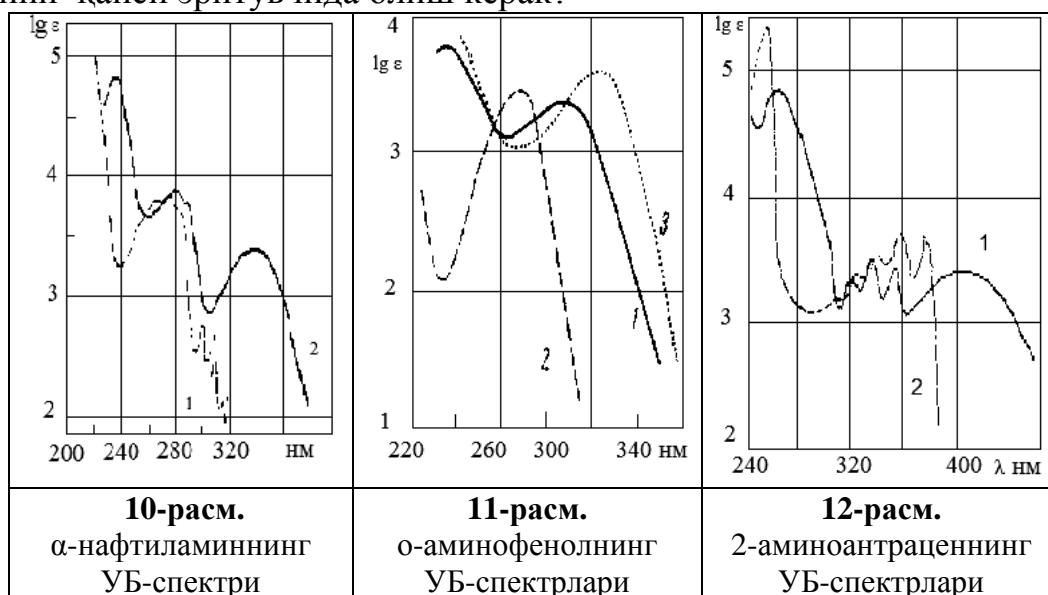
3.9. 9-расмда келтирилган мезитил (4-метилпентен-3-он-2) оксидининг ютилиш эгрлари қайси эритувчига (н-гексан, этил спиртига, сувга) тегишли эканини аниқланг. Спектрларда содир бўладиган ўзгаришларни тушунтиринг.



3.10. 10-расмда  $\alpha$ -нафтиламинни спиртли эритмада ва кислотали сув-спиртли эритмада спектрлари келтирилган. Ҳар бир эгри қайси эритувчига тегишли эканини аниқланг.

3.11. *o*-Аминофенол этанолли эритмада 11(I)-расмда келтирилган спектрга эга. Шу расмнинг ўзида *o*-аминофенолни кислота ва ишқорнинг сувли эритмаларидаги спектрлари берилган. Ҳар бир ютилиш эгриси қайси эритувчига тегишли эканлигини аниқланг.

3.12. 2-Аминоантрацен (нафталин) этанол эритмасида 12(I)-расмда берилган спектрни беради. 2-эгри чизикни олиш учун 2-аминоантраценни спектрини қайси эритувчида олиш керак?



#### 4. Модда тузилишини унинг ИҚ-спектри билан солиштириш

4.1. Бирикманинг ИҚ-спектрида 3470, 3380, 2250, 2970 ва 2895  $\text{см}^{-1}$  чизиқлар мавжуд, 2000–3500  $\text{см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиқлари кузатилмайди. Бу спектр қайси бирикмага хос:  $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ,  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{C}\equiv\text{N}$  ёки  $\text{CH}_3-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ?

4.2. ИҚ-спектрда 3400, 2970, 2250  $\text{см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиқлари кузатилиши билан бир қаторда ва 2000–3500  $\text{см}^{-1}$  соҳада умуман кузатилмайди. Бу спектр қайси моддага тегишли:  $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ,  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{C}\equiv\text{N}$  ёки  $\text{CH}_3-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ?

4.3. ИҚ-спектрда 3470, 3380, 2930, 2850, 2250  $\text{см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиқлари кузатилади ва 2000–3500  $\text{см}^{-1}$  соҳада кузатилмайди. Бу спектр қайси моддага тегишли:  $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ,  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{C}\equiv\text{N}$  ёки  $\text{CH}_3-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ?

4.4. ИҚ-спектрда 1280  $\text{см}^{-1}$  частота кузатилса ва 600–700  $\text{см}^{-1}$  соҳада кузатилмаса, бирикманинг формуласи қандай бўлади?



4.5. Агар модданинг ИҚ-спектрида 1725, 3500 ва 900  $\text{см}^{-1}$  чизиқлар бўлса, унинг формуласи қандай:  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$  ёки  $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ ?

4.6. Агар ИҚ-спектрда 1650, 1710, 3350  $\text{см}^{-1}$  частоталар аниқланган бўлса, бирикма қайси формулага мос келади? С-Н валент тебранишлари соҳасида 2970, 2930, 2870 ва 2850  $\text{см}^{-1}$ :  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$  ёки  $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{NH}$  чизиқлар мавжуд?

4.7. ИҚ-спектрда 2250, 3600  $\text{см}^{-1}$  чизиқлар мавжуд. С-Н валент тебранишлари соҳасида 2970, 2870, 2895  $\text{см}^{-1}$  соҳада ютилиш кузатилади. Бу спектр қайси бирикмага хос:  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$  ёки  $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{NH}$ ?

4.8. Агар ИҚ-спектрда 1740, 2800 ва 960  $\text{см}^{-1}$  бўлса, унинг формуласи:  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$  ёки  $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ ?

4.9. Агар ИҚ-спектрда 2970, 2930, 2870, 2850, 1653 ва 1613  $\text{см}^{-1}$  частоталар аниқланган бўлса, бирикма қандай формулага эга бўлади:  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NO}_2$  ёки  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{N}=\text{O}$ ?

4.10. Диметилсульфиднинг  $\text{CH}_3-\text{S}-\text{CH}_3$  оксидланиши натижасида иккита маҳсулот - сульфоксид  $\text{CH}_3-\text{SO}-\text{CH}_3$  ёки сульфон  $\text{CH}_3-\text{SO}_2-\text{CH}_3$  ҳосил бўлиши мумкин. Оксидланиш маҳсулотининг ИҚ-спектрида 1045  $\text{см}^{-1}$  чизиқ мавжуд, 1120–1160 ва 1300–1350  $\text{см}^{-1}$  соҳаларда чизиқ кузатилмайди. Қайси маҳсулот ҳосил бўлган?

4.11. Диметилсульфид  $\text{CH}_3\text{SCH}_3$  оксидланган вақтда қандай маҳсулот ҳосил бўлади: диметилсульфоксидми ( $\text{CH}_3-\text{SO}-\text{CH}_3$ ) ёки диметилсульфонми ( $\text{CH}_3-\text{SO}_2-\text{CH}_3$ ), бунда ИҚ-спектрда 1320 ва 1150  $\text{см}^{-1}$  чизиқлар топилган, 1030–1070  $\text{см}^{-1}$  чизиғи кузатилмайди?

4.12. Агар ИҚ-спектрда 3600, 1550, 1370, 2970, 2870 ва 2895  $\text{см}^{-1}$  частоталар аниқланган бўлса, нитробирикма қайси формулага тегишли эканини аниқланг:  $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{OH})-\text{NO}_2$  ёки  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{O}-\text{NO}_2$  ?

4.13. Агар ИҚ-спектрда 1630, 1280, 2970, 2870, 2930 ва 2850  $\text{см}^{-1}$  частоталар аниқланган бўлса, нитробирикма қайси формулага тегишли эканини аниқланг:  $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-NO}_2$  ёки  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-NO}_2$ ?

4.14. Агар ИҚ-спектрда 2136 ва 1591  $\text{см}^{-1}$  частоталар кузатилса, спектр қайси бирикмага тегишли:  $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Sn-C}\equiv\text{C-CH=CH}_2$  ёки  $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Sn(CH=CH}_2)(\text{CH=CH-C}_2\text{H}_5)$

4.15. ИҚ-спектрда 1630, 3450, 3370, 2970, 2870, 2850  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Бу спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CO-N(CH}_3)_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO-NHCH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO-NH}_2$ ?

4.16. ИҚ-спектрда 1705, 3600, 2970, 2870, 2930, 2850, 2895  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Бу спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_2\text{-CO-CH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOCH}_3$ ?

4.17. ИҚ-спектрда 1740, 2979, 2870, 2930 ва 2850  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH(OH)CH}_2\text{COCH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_3$ ?

4.18. ИҚ-спектрда 1382, 1465, 2860, 2950, 2120, 3300  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH=CHCH}_3$ ,  $\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH=CH-CH=CH-CH}_2\text{-CH}_3$ ?

4.19. ИҚ-спектрда 1380, 1468, 2860, 2950, 1710  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH=CHCH}_2\text{OH}$  ёки  $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_3$ ?

4.20. ИҚ-спектрда 970, 1380, 1468, 1640, 2860, 2950, 3030, 3400  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH=CHCH}_2\text{OH}$  ёки  $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_3$ ?

4.21. ИҚ-спектрда 1382, 1465, 1600, 2860, 2950  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-CH=CH-CH}_2\text{CH=CHCH}_3$ ,  $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-CH=CH-CH=CH-CH}_2\text{CH}_3$ ?

4.22. ИҚ-спектрда 960, 1382, 1464, 1640, 2860, 2950, 3100  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH=CHCH=CHCH}_2\text{CH}_3$  ёки  $\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ?

4.23. ИҚ-спектрда 1650, 2870, 2970  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO-NH}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO-NHCH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{CO-N(CH}_3)_2$ ?

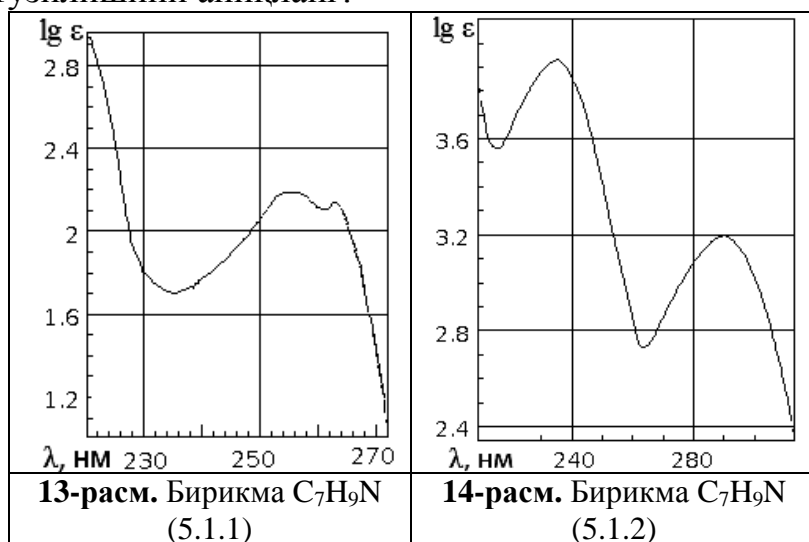
4.24. ИҚ-спектрда 1680, 2850, 2870, 2930, 2970, 3450  $\text{см}^{-1}$  соҳада чизиклар кузатилади. Спектр қайси бирикмага тегишли:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO-NH}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO-NHCH}_3$  ёки  $\text{CH}_3\text{CO-N(CH}_3)_2$ ?

## 5. Электрон ва тебранма спектрлардан биргаликда фойдаланиш

5.1. Бирикмаларнинг спектрлари тўғрисидаги маълумотлар бўйича бирикманинг тузилишини аниқланг.

5.1.1. УБ-спектри 13-расмда келтирилган бирикманинг  $C_7H_9N$  тузилишини аниқланг. Унинг ИҚ-спектрида  $3480$  ва  $3390\text{ см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиқлари кузатилади.

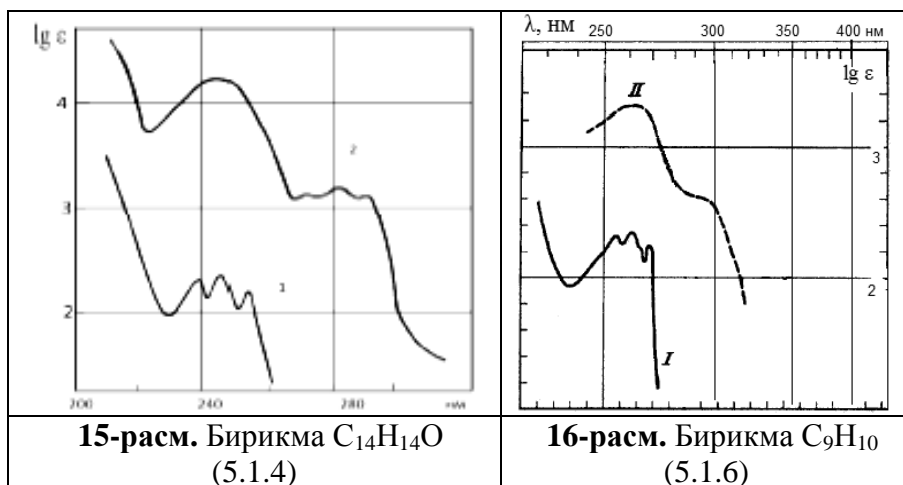
5.1.2.  $C_7H_9N$  бирикманинг ИҚ-спектрида иккита кескин ютилиш чизиқлари  $3500\text{--}3300\text{ см}^{-1}$  мавжуд. Бирикманинг УБ-спектри 14-расмда келтирилган. Бу бирикманинг тузилишини аниқланг.



5.1.3. Агар иккита бирикмадан биринчисининг ютилиш частотаси  $1710\text{ см}^{-1}$  да намоён бўлса ва УБ спектрида  $280\text{ нм}$  ( $lg\epsilon=1.2$ ) ютилиши кузатилса, иккинчиси -  $1732\text{ см}^{-1}$  да ва  $292\text{ нм}$  ( $lg\epsilon=1.2$ ) ютилиши кузатилса, умумий формуласи  $C_4H_8O$  бўлган бирикмалар қайси синфга мансублигини айтинг.

5.1.4. Иккита бирикманинг таркиби  $C_{14}H_{14}O$  бўлса, уларнинг иккаласининг ҳам ИҚ спектрларида  $3200\text{--}3600\text{ см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиқлари йўқ, ароматик халқа учун хос бўлган  $3000, 1600, 1500\text{ см}^{-1}$  соҳада эса бор. Бирикмаларнинг УБ спектрлари (15-расм) ўзаро фарқланади. Бу бирикмаларни тузилишини аниқланг. Таклиф этилган тузилишларни тасдиқлаш учун яна қандай спектрал характеристикаларни келтириш мумкин?

5.1.5. Бир хил брутто формулага  $C_7H_{12}O$  эга бўлган иккита органик бирикмалар спектрал характеристикаларига кўра фарқ қилади: биринчи бирикма учун ИҚ-спектрда  $1718\text{ см}^{-1}$  интенсив чизиқ,  $1630\text{ см}^{-1}$  да ўртача интенсивликдаги чизиқ кузатилади, унинг электрон спектрида  $280\text{ нм}$   $lg\epsilon = 1.2$  да паст интенсивликдаги ютилиш чизиғи кузатилади. Иккинчи бирикма учун ИҚ спектрда иккита интенсив чизиқ -  $1600$  ва  $1670\text{ см}^{-1}$  кузатилади, унинг УБ спектрларида иккита ютилиш чизиқлари -  $lg\epsilon = 4.1$  ва  $\lambda_{\text{макс}} = 220\text{ нм}$  да интенсив,  $300\text{ нм}$  ва  $lg\epsilon = 1.5$  да паст интенсивликка эга чизиқлар кузатилади.



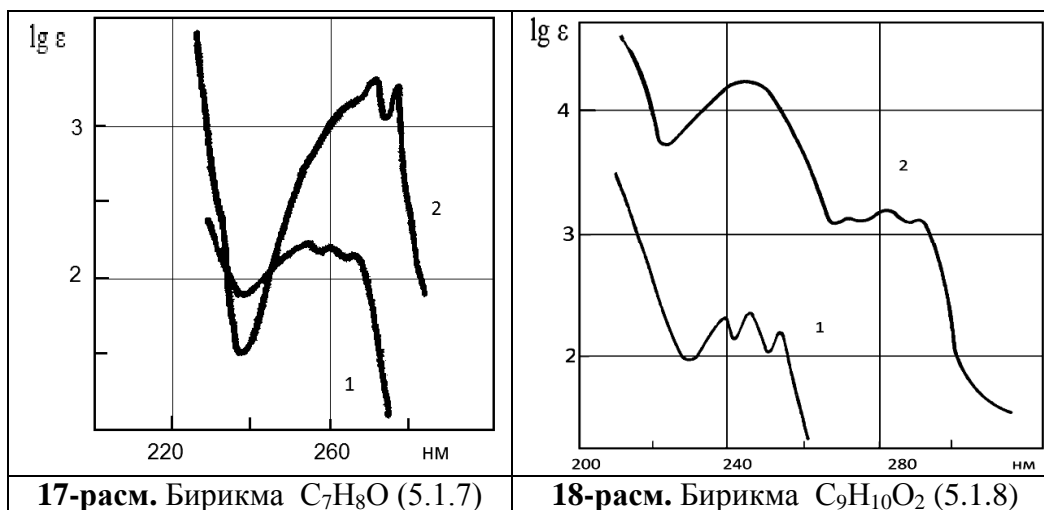
Бирикманинг тузилишидаги қандай ўзгаришлар ИҚ ва УБ спектрларда фарқларни келтириб чиқариши мумкин?

5.1.6. Брутто формуласи  $C_9H_{10}$  бўлган модда ИҚ спектрида  $1650\text{ см}^{-1}$  соҳада ўртача интенсивликдаги ютилиш чизиғига эга, УБ спектрда ҳам ютилиш чизиғи мавжуд (16-расм). УБ нурланиш таъсирида изомерланиш содир бўлади. Бунда ИҚ спектрада  $1650\text{ см}^{-1}$  чизиғи йўқолади ва  $1625\text{ см}^{-1}$  соҳада интенсив чизик пайдо бўлади. УБ спектр ҳам сезиларли ўзгаради: ютилиш чизиғи батохром ўзгаради, унинг интенсивлиги ортади (16-расм). Бошланғич бирикмани ва унинг изомерланиш маҳсулоти тузилишини аниқланг.

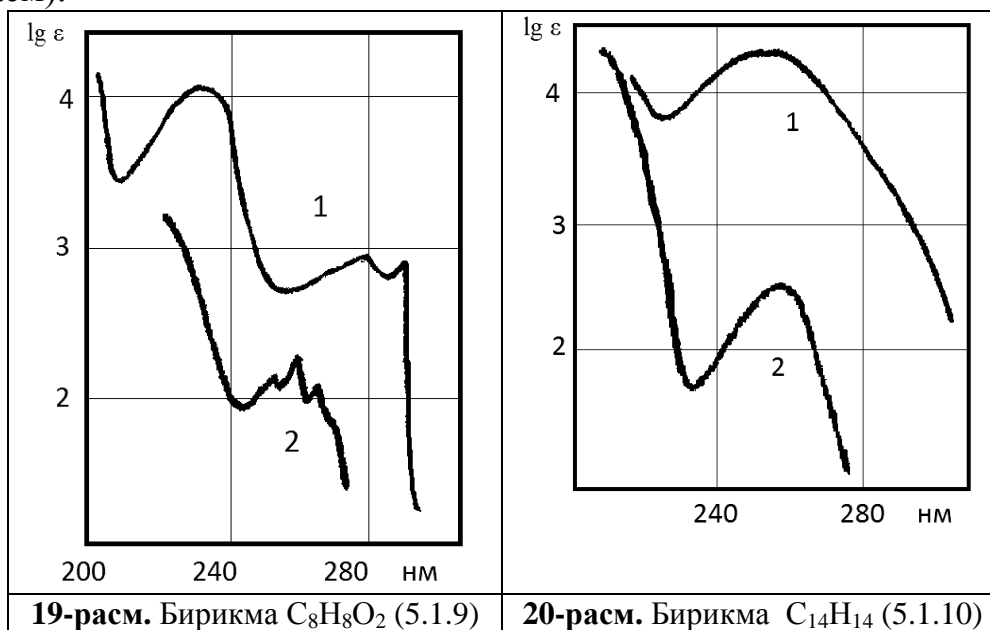
5.1.7. Брутто формуласи  $C_7H_8O$  бўлган иккита бирикмаларнинг спектрлари  $3400\text{--}3600\text{ см}^{-1}$  соҳада ютилиши билан фарқ қилади: биринчиси бу соҳада ютмайди, иккинчиси ютади, унинг хусусияти моддаларнинг  $CCl_4$  эритмадаги концентрацияси ўзгариши билан ўзгариб боради. Бу моддаларнинг УБ спектрлари 17-расмда берилган. Бирикмаларнинг тузилишини аниқланг ва бу моддалар ИҚ спектрининг характери С-Н валент тебранишлар соҳасида қандай эканлигини аниқланг.

5.1.8. Брутто формуласи  $C_9H_{10}O_2$  бўлган иккита бирикмалар турли спектрал характеристикаларга эга. Биринчи бирикма ИҚ спектрада  $1720\text{ см}^{-1}$  соҳада чизикка эга; унинг УБ спектри 18(1)-расмда берилган. Иккинчи бирикмада ИҚ спектрада  $1680\text{ см}^{-1}$  соҳада интенсив ютилиш чизиғи кузатилади ва унга 18 (20) расмда берилган УБ спектр мос келади. Иккала спектрларда ҳам  $3300\text{--}2500\text{ см}^{-1}$  соҳада кенг ютилиш чизиғи мавжуд. Бирикмаларни тузилиши ҳақида тасаввурингизни айтинг ва бу бирикмаларнинг ИҚ спектраларида қандай фарқлар кузатилади?

5.1.9. Брутто формуласи  $C_8H_8O_2$  бўлган, УБ спектрлари 19-расмда келтирилган иккита бирикманинг тузилишини аниқланг. Биринчи бирикманинг ИҚ спектрида  $1718\text{ см}^{-1}$  ва  $3000\text{ см}^{-1}$  соҳада кенг ютилиш чизиғи кузатилади. Иккинчи бирикманинг ИҚ спектрида  $1720\text{ см}^{-1}$  соҳада кенг чизик кузатилади ва  $3000\text{ см}^{-1}$  соҳада ютилиш чизиклари кузатилмайди.



5.1.10. Қуйидаги маълумотларга таянган ҳолда, бирикмаларнинг тузилишини аниқланг: а) элемент анализдан маълумки, бирикма таркибида 1:1 нисбатда фақат углерод ва водород бор, молекуляр массаси -182 а.м.б. УБ спектри 20(1)-расмда берилган. ИҚ спектрада бензол халқасини характерлайдиган чизиклар мавжуд. Бирикманинг тузилиши ҳақидаги тасавурларингизни айтинг. б) худди шу таркибдаги ва ИҚ спектрада айнан спектрал характеристикаларга эга бўлган бирикма УБ спектри фарқ қилади (20(2)-расм).

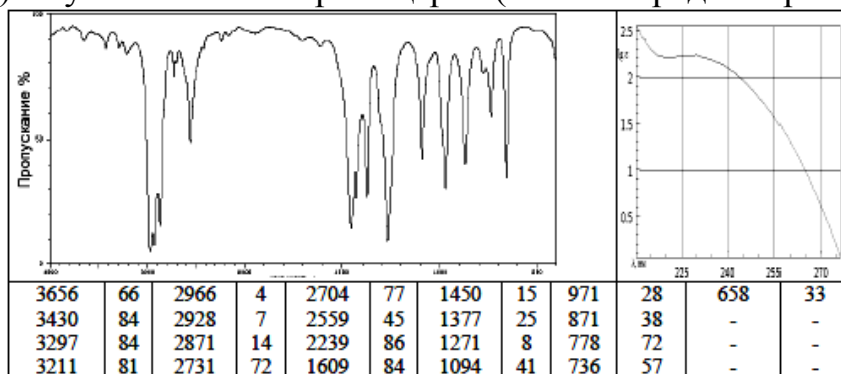


5.1.11. Изопропил спиртининг ИҚ-спектрида унга ацетил хлорид билан ишлов берилганда қандай ўзгариш юз беришини аниқланг.

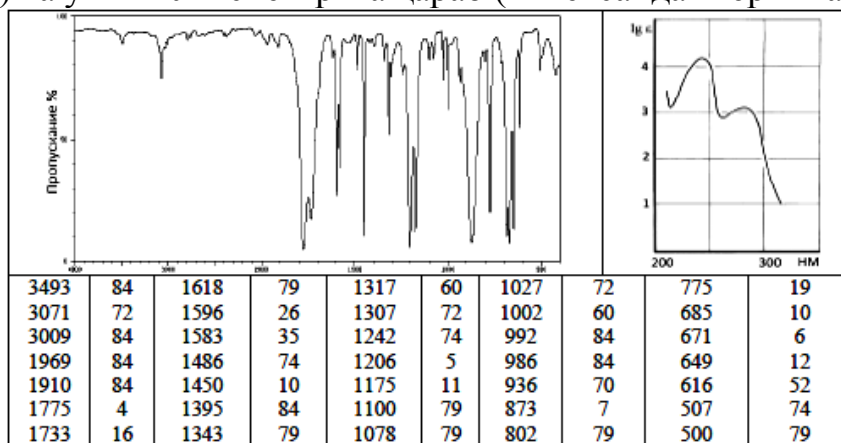
5.1.12. о-нитрофенолнинг ИҚ-спектрини КВг ёки суолтирилган  $CHCl_3$  эритмасида олинганда бир хил  $3200\text{ см}^{-1}$  соҳасида частотага эга бўлиб, худди шундай шароитда *n*-нитрофенолнинг ИҚ-спектри олинганда икки хил  $3325$  и  $3530\text{ см}^{-1}$  соҳада нур ютилиши кузатилади. Буни қандай изохлайсиз?

5.2. УБ, ИҚ, спектрлари асосида органик бирикмаларни тузилишини аниқланг. Спектрларнинг расмлари, частоталарининг жадвали ва тебранма спектрларнинг интенсивликлари (%) келтирилган:

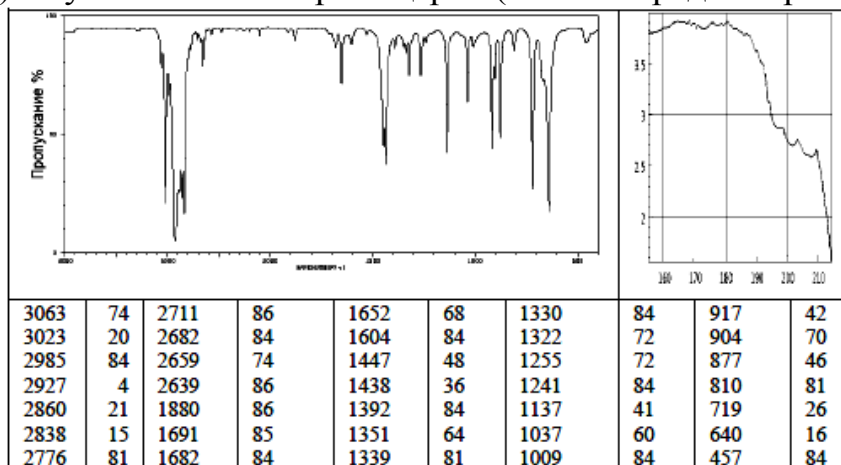
5.2.1. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб ( этил спиртдаги эритма) аниқланг.



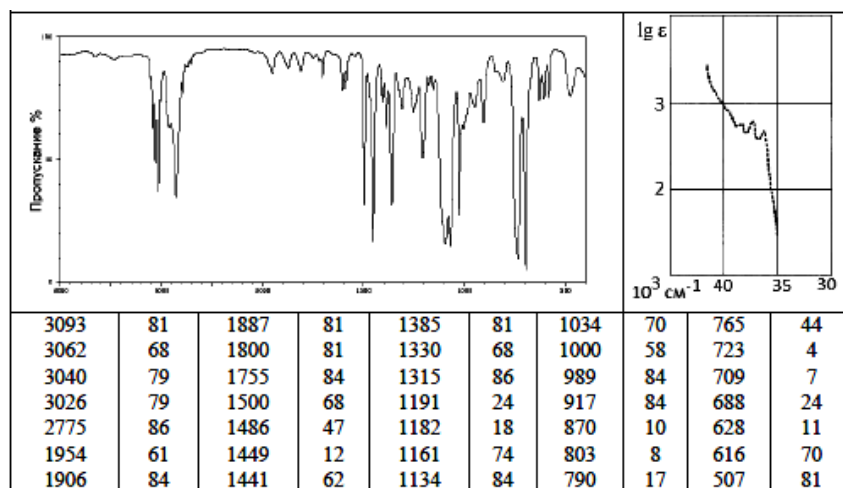
5.2.2. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб ( н-гександаги эритма) аниқланг.



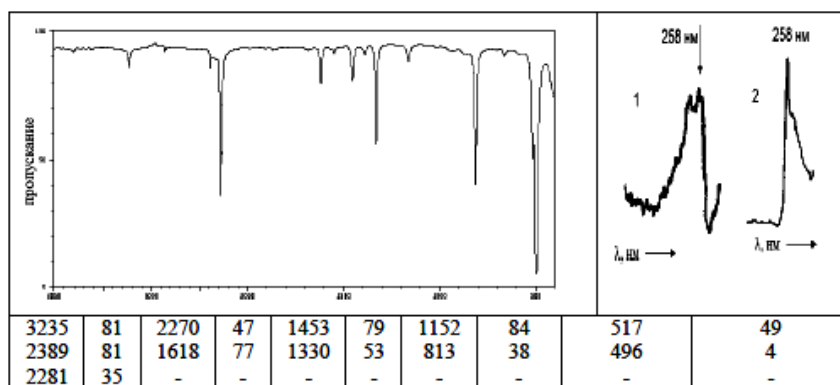
5.2.3. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб ( этил спиртдаги эритма) аниқланг.



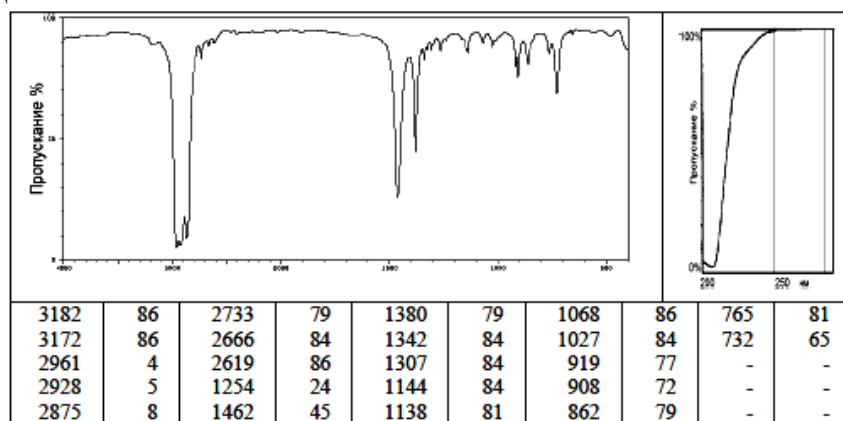
5.2.4. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритма) аниқланг.



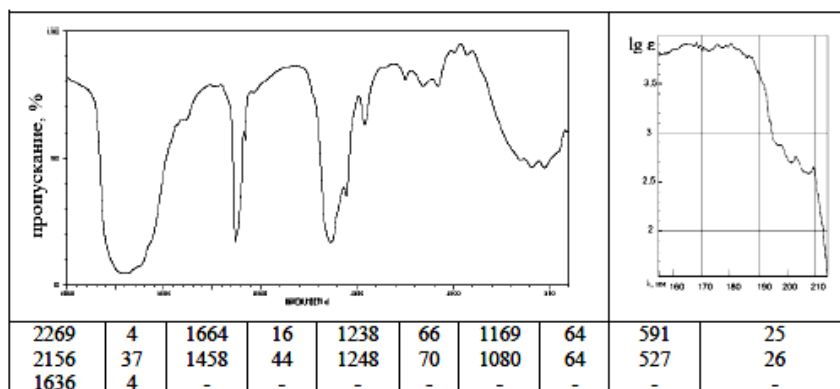
5.2.5. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (1 – кристалл 20 Кда, 2-газ фаза) аниқланг.



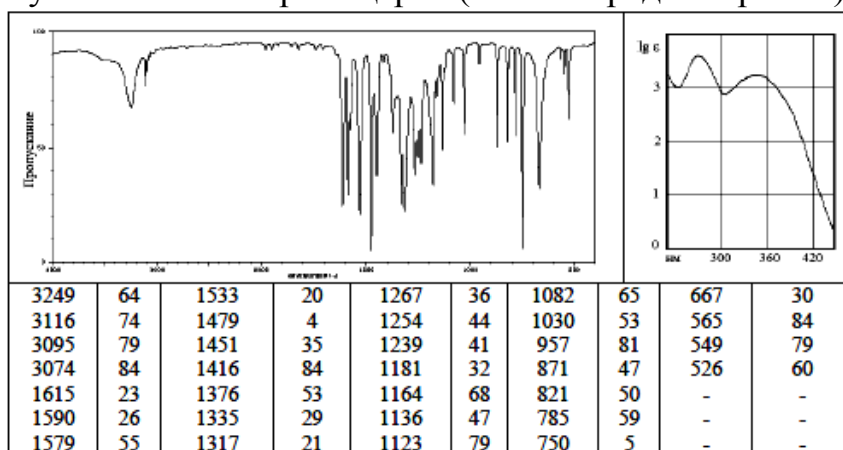
5.2.6. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (қалинлиги 1 см бўлган кварцли кювета) аниқланг.



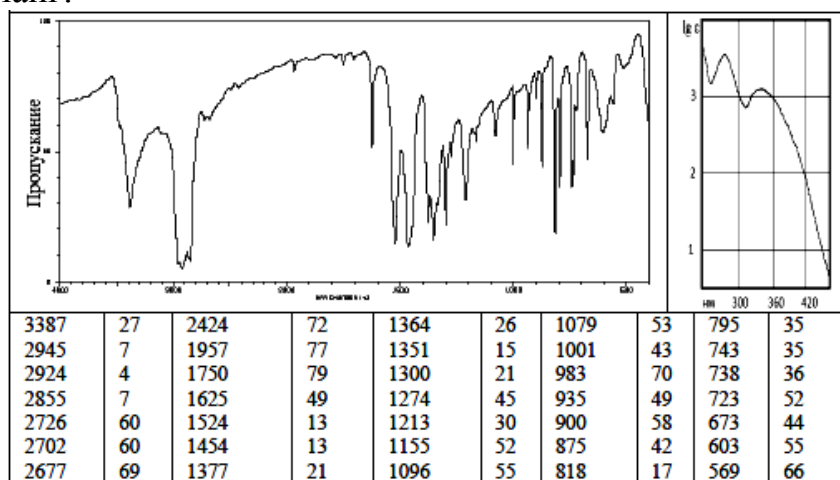
5.2.7. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (этил спиртдаги эритма) аниқланг.



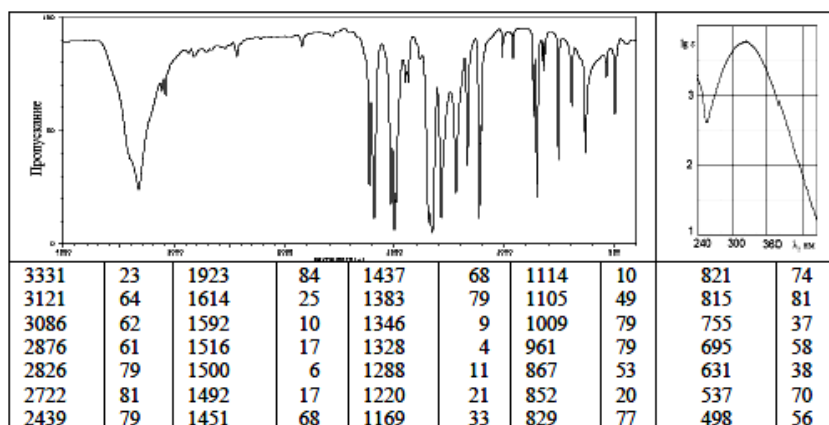
5.2.8. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (КВr таблеткаси) ва унинг УБ-спектрига қараб (этил спиртдаги эритма) аниқланг.



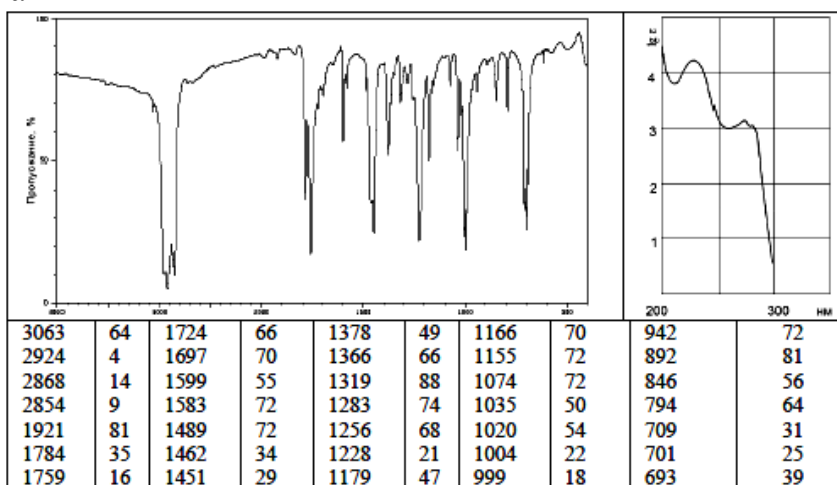
5.2.9. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (вазелиндаги суспензияси) ва унинг УБ-спектрига қараб (этил спиртдаги эритма) аниқланг.



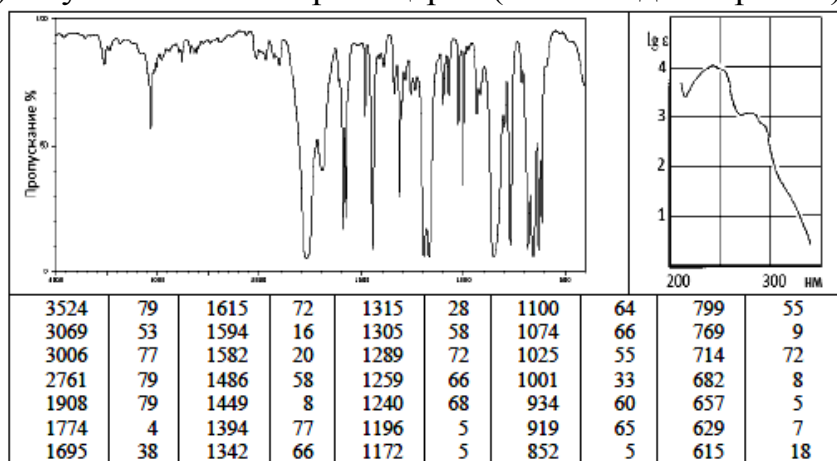
5.2.10. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (КВr таблеткаси) ва унинг УБ-спектрига қараб (этил спиртдаги эритма) аниқланг.



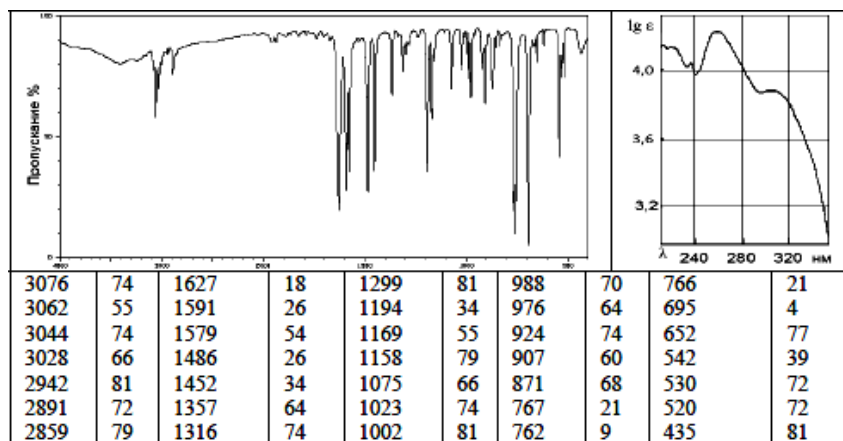
5.2.11. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (вазелиндаги суспензияси) ва унинг УБ-спектрига қараб (этил спиртдаги эритма) аниқланг



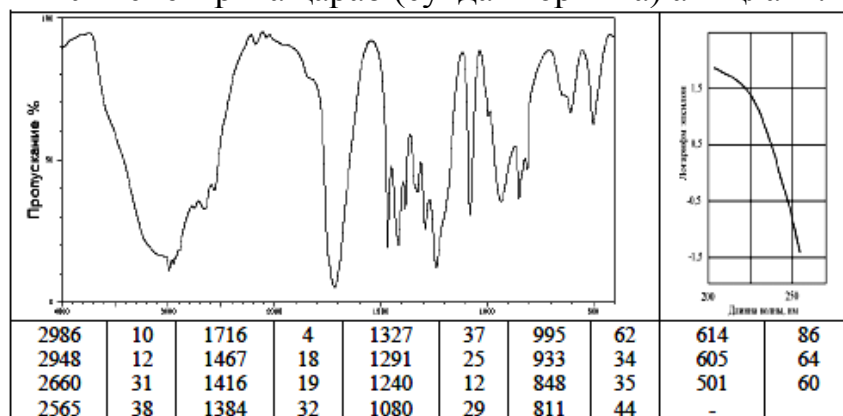
5.2.12. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритма) аниқланг.



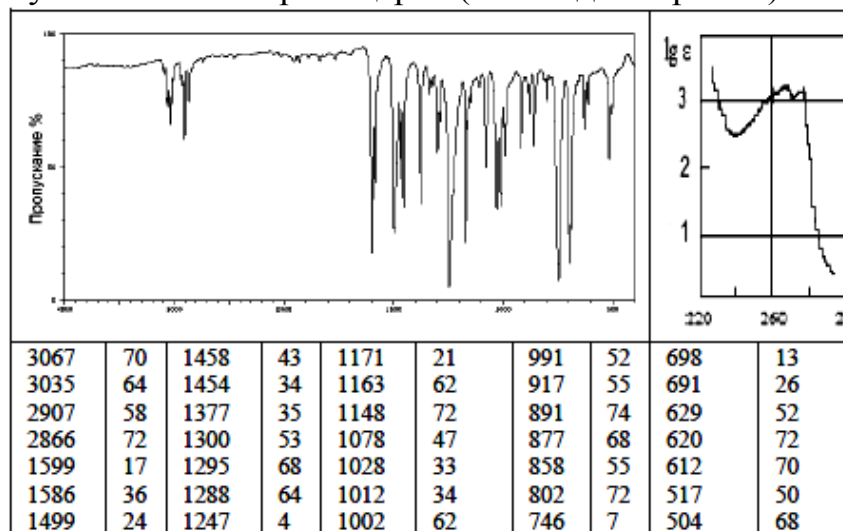
5.2.13. Органик бирикманинг тузилишини моддаларнинг ИҚ спектрига (КВr таблеткаси) ва унинг УБ-спектрига қараб (циклогександаги эритма) аниқланг.



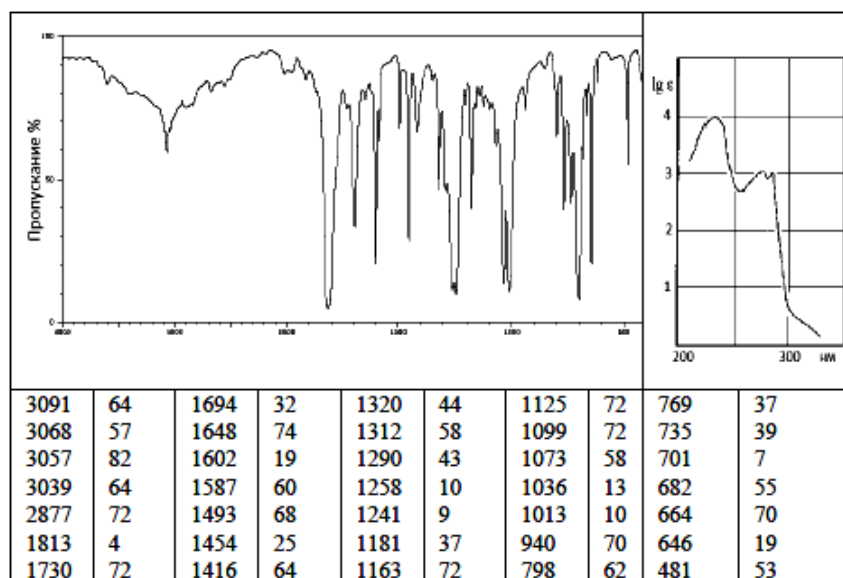
5.2.14. Органик бирикманнинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УВ-спектрига қараб (сувдаги эритма) аниқланг.



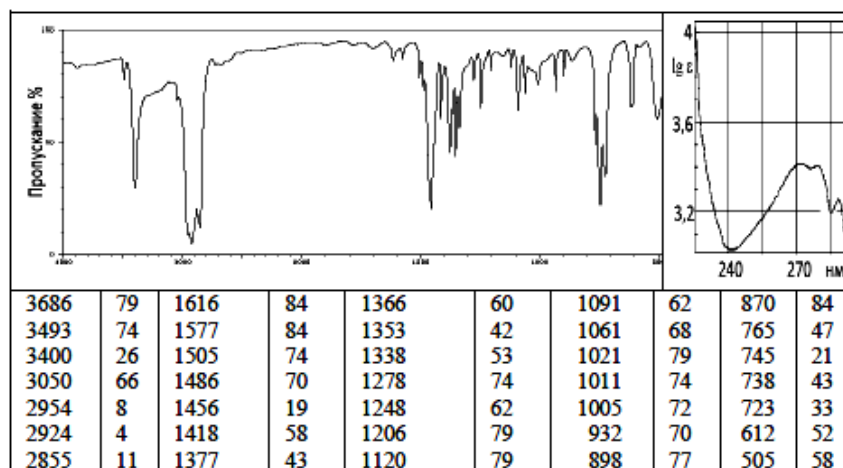
5.2.15. Органик бирикманнинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (КВr таблеткаси) ва унинг УВ-спектрига қараб (этанолдаги эритма) аниқланг.



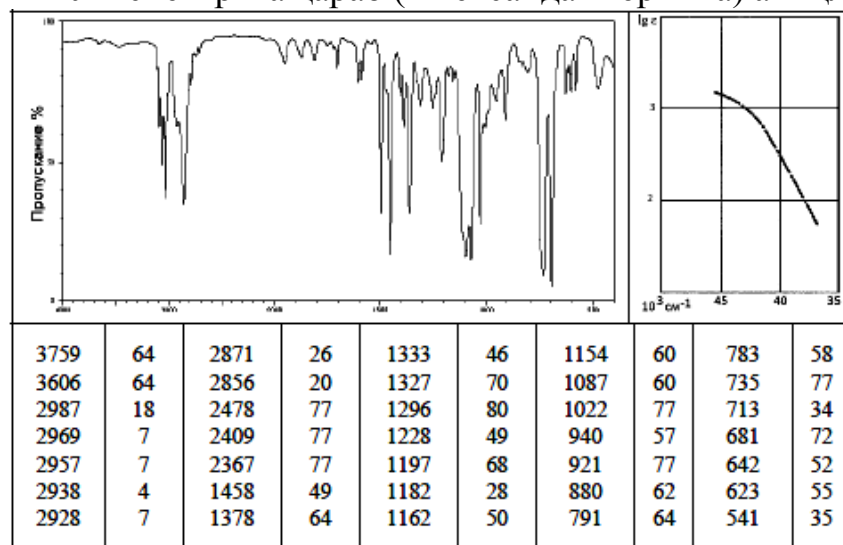
5.2.16. Органик бирикманнинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УВ-спектрига қараб (циклогександаги эритма) аниқланг.



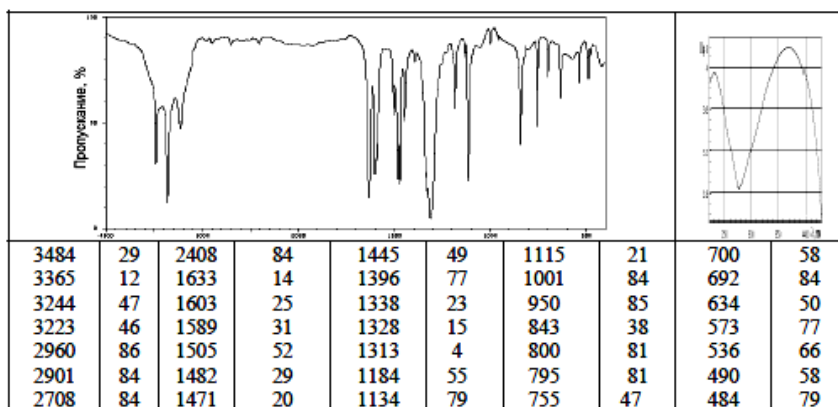
5.2.17. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (вазелин мойдаги суспензия) ва унинг УБ-спектрига қараб (метанолдаги эритма) аниқланг.



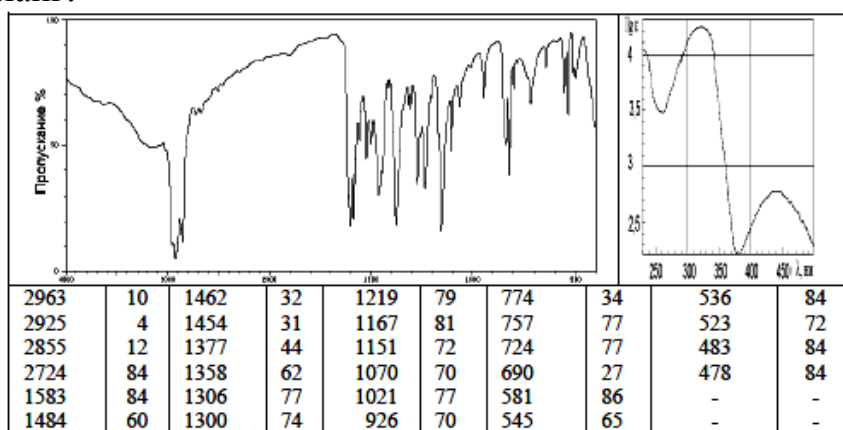
5.2.18. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритма) аниқланг.



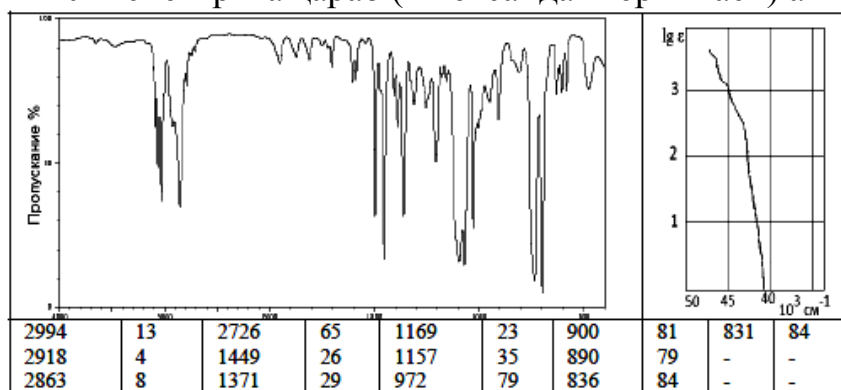
5.2.19. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (КВr таблеткаси) ва унинг УБ-спектрига қараб (этанолдаги эритма) аниқланг.



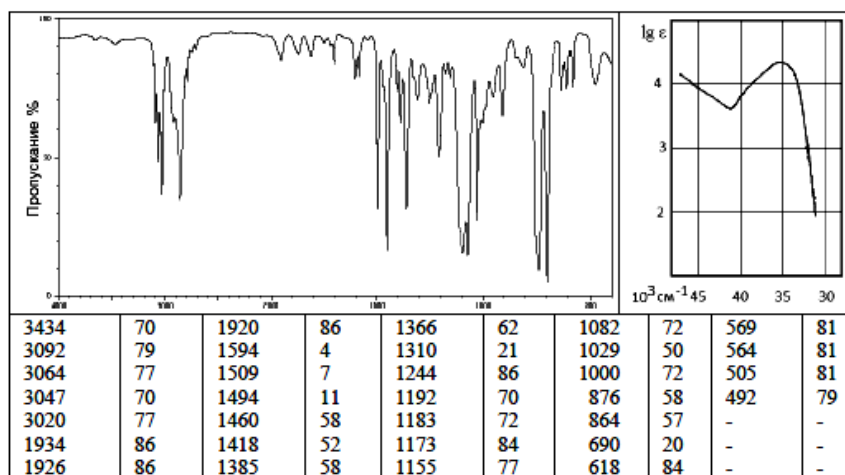
5.2.20. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (вазелин мойидаги суспензия) ва унинг УБ-спектрига қараб (этанолдаги эритма) аниқланг.



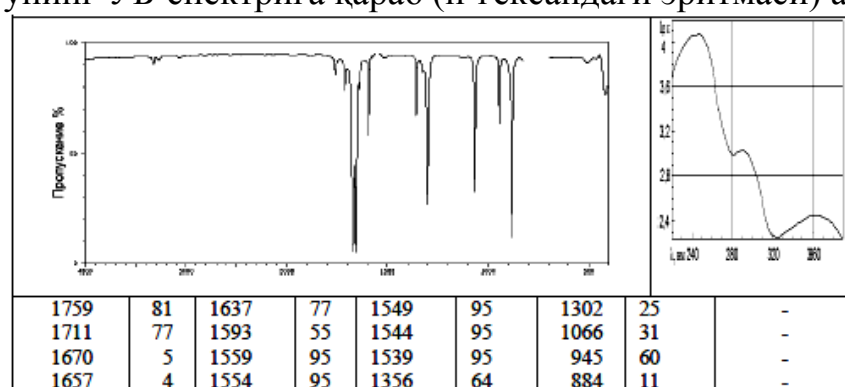
5.2.21. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритмаси) аниқланг.



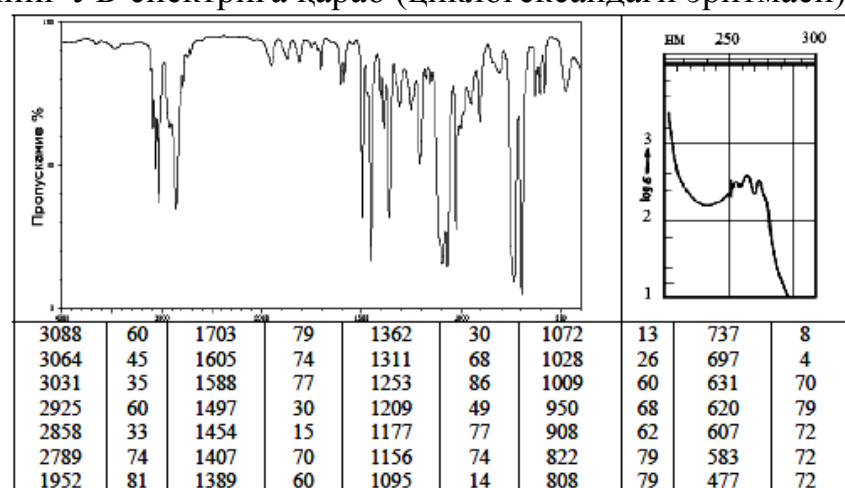
5.2.22. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (кукун) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритмаси) аниқланг.



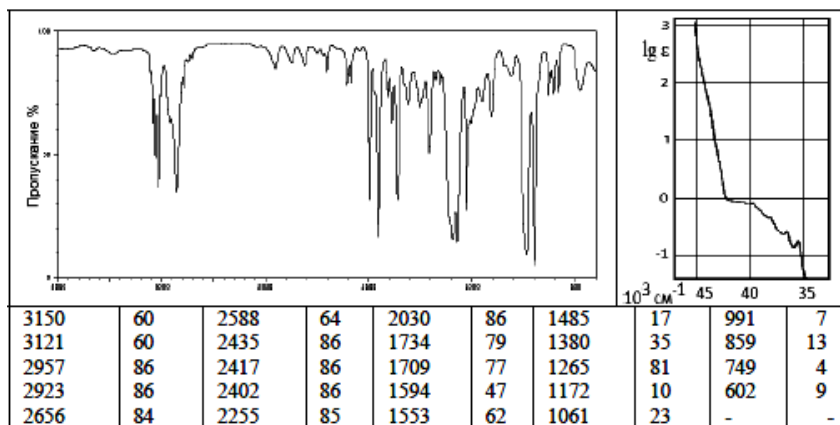
5.2.23. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига ( $\text{CCl}_4$  эритмаси) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритмаси) аниқланг.



5.2.24. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (циклогександаги эритмаси) аниқланг.



5.2.25. Органик бирикманинг тузилишини модданинг ИҚ спектрига (суяқ пленка) ва унинг УБ-спектрига қараб (н-гександаги эритмаси) аниқланг.


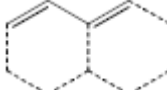



## ҚҰШИМЧА МАЪЛУМОТЛАР


### I. ЭЛЕКТРОН СПЕКТРОСКОПИЯ

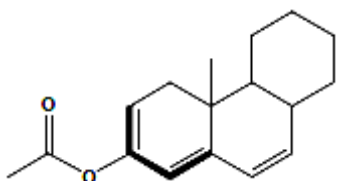
1.1. Вудворд–Физер қондаси,  $\pi$ - $\pi^*$  -ўтиши,  $\lambda_{max}$  (нм),  $Ig \epsilon \approx 4$ .

Бошланғич система:

Хромофор		$\lambda_{max}$ (нм)
Ациклик		217
Гетероануляр		214
Гомоануляр		253

Инкрементлар:

	$\lambda_{max}$ (нм)
Алкил ўринбосар ёки ҳалқанинг хромофор группаси тутмаган қисми	+ 5
Туташган қўш боғ, хромофорликни кучайтиради	+ 30
Экзоциклик табиатли қўш боғ 	+ 5
Br	+ 5
Cl	+ 5
O-алкил	+ 5
O-ацил	0
S-алкил	+ 30
N(алкил) <sub>2</sub>	+ 60
Эритувчи бўйича тўғрилаш	0

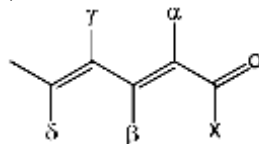


Масалан:

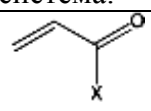
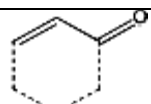
$$\lambda_{max} \text{ (нм)} = 253 + 30 \text{ (қўшимча қўш боғ)} + 5 \text{ (экзоцикл. қўш боғ)} + 3 \cdot 5 \text{ (алкил. ўринбосар)} + 0 \text{ (ОСОСН}_3 \text{ группаси)} = 303$$

$$\lambda_{\text{эксп.}} \text{ (нм)} = 306 \text{ нм.}$$

1.2.  $\alpha$ , $\beta$ -тўйинмаган карбонил бирикмаларнинг нур ютиши.,  $\pi$ - $\pi^*$  -ўтиши,  $\lambda_{max}$  (нм),  $Ig \epsilon \approx 4$ . Вудворднинг кенгайтирилган қондаси.

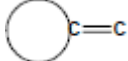



Бошланғич система:

	X = алкил	215
	X = H	207
	X = OH	193
	X = O-алкил	193
		215

		202
---	--	-----

Инкрементлар:

			$\lambda_{\max}$ (нм)	
Туташган қўш боғ, хромофорликни кучайтиради				
Экзоциклик қўш боғ				
Гомоаннуляр диен системаси				
Таркибида қўш боғлар ситемаси бўлган ўринбосарлар учун	Инкремент			
	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$ и далее
Алкил	+10	+12	+18	+18
Cl	+15	+12		
Br	+25	+30		
ОН	+35	+30		+50
О-алкил	+35	+30	+17	+31
О-COCH <sub>3</sub>	+6	+6	+6	+6
S-алкил		+85		
N(алкил) <sub>2</sub>		+95		

Эритувчи бўйича тузатишлар:

Эритувчи	Тузатиш	Эритувчи	Тузатиш
Сув	-8	Метанол	0
Гексан	+11	Этанол	0
Циклогексан	+11	Диэтил эфири	+7
Хлороформ	+1	Диоксан	+5

### 1.3. Бензол ҳосилаларидаги нур ютиш максимуми ҳолати, $\lambda_{\max}$ (нм), $lg \epsilon \approx 4$ .

Бошланғич қиймат: 203,5 нм.

Ўринбосар	Инкремент	Ўринбосар	Инкремент
-CH <sub>3</sub>	3,0	-NHCOCH <sub>3</sub>	38,5
-Cl	6,0	-NO <sub>2</sub>	65,0
-Br	6,5	-CN	20,5
-ОН	7,0	-CHO	46,0
-O <sup>-</sup>	31,5	-COCH <sub>3</sub>	42,0
-OCH <sub>3</sub>	13,3	-COOH	25,5
-NH <sub>2</sub>	26,5		

### 1.4. Ароматик карбонил бирикмалардаги нур ютиш максимуми ҳолати, $\lambda_{\max}$ (нм), $lg \epsilon \approx 4$ . Скотт қоидаси.

Бошланғич система:

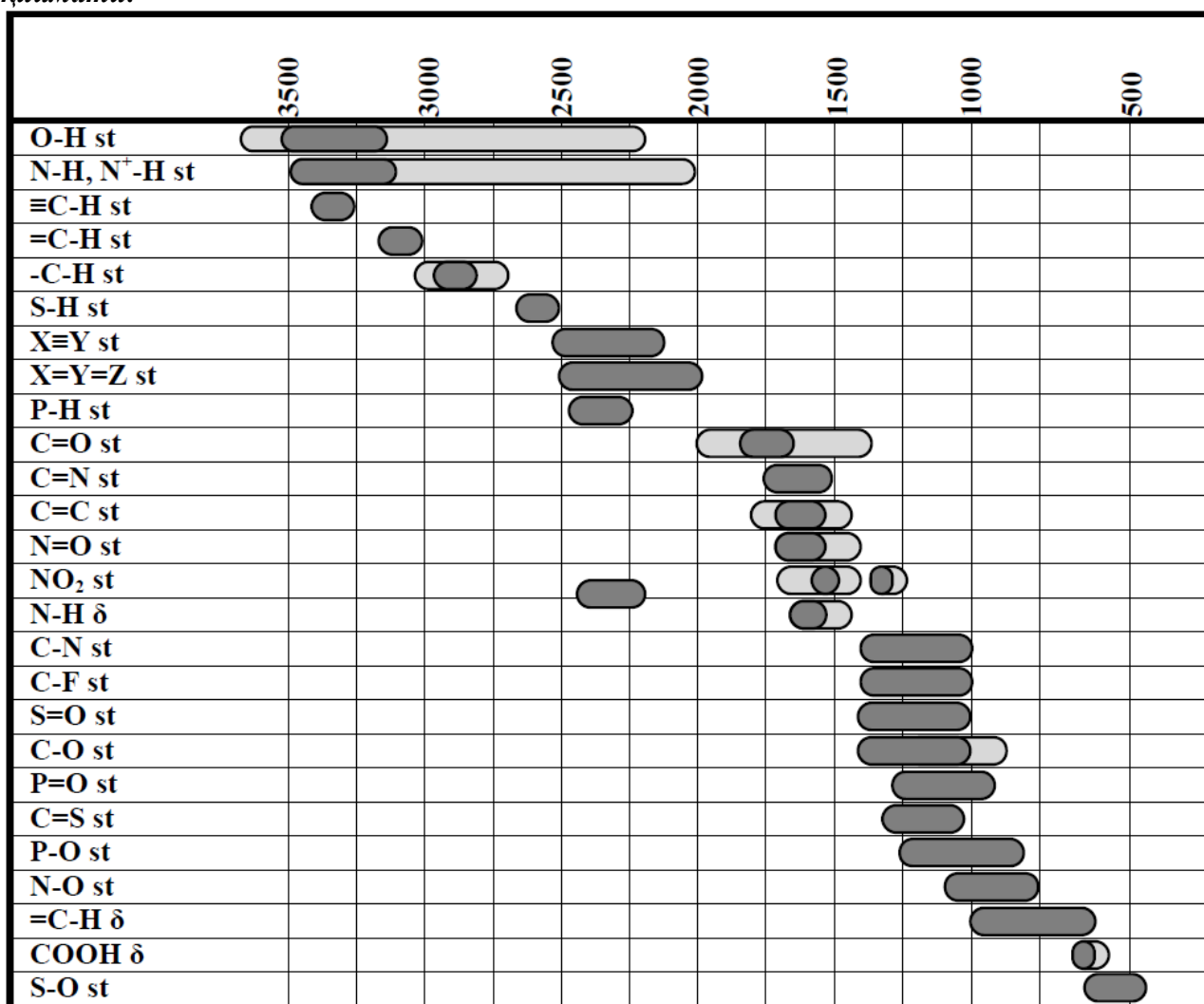
Ph-CO-H	250	Ph-CO-OH	230
Ph-CO-Alk	246	Ph-CO-OR	230

Ўринбосар	орто	мета	пара
-алкил	3	3	10
-циклоалкил	3	3	10

-Cl	0	0	10
-Br	2	2	15
-OH	7	7	25
-O-Alk	7	7	25
-O-	11	20	78
-NH <sub>2</sub>	13	13	58
-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20	20	85
-NHCOCH <sub>3</sub>	20	20	45

## II. ТЕБРАНИШ СПЕКТРОСКОПИЯСИ

2.1. ИҚ-спектр соҳасида кузатиладиган энг асосий ютилиш частоталари қиймати:



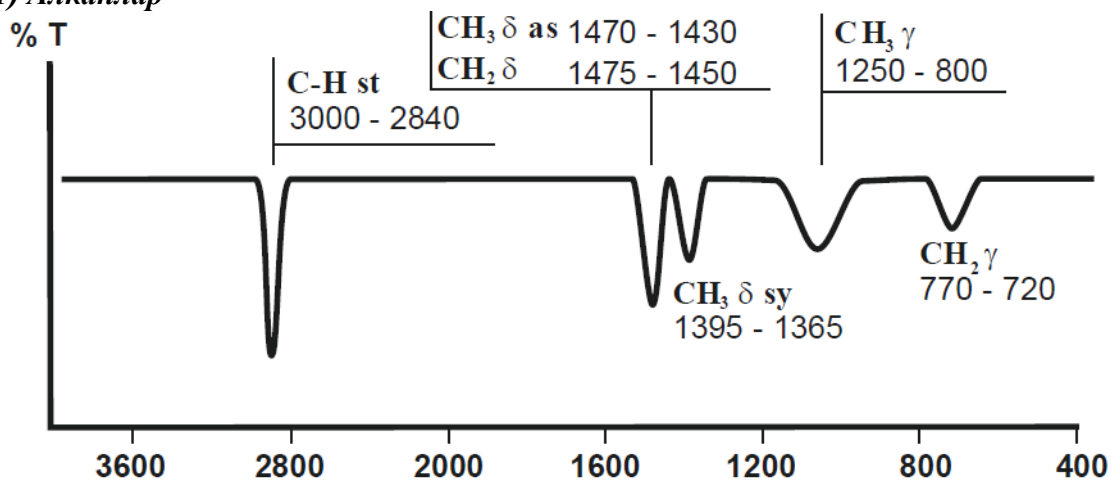
2.2. Тебраниш турларини номлашда ишлатиладиган қисқартмалар:

<b>as</b>	ассиметрик	<b>ip</b>	текислик бўйича тебраниш
<b>s</b>	симметрик	<b>oop</b>	текисликдан ташқаридаги тебраниш
<b>comb</b>	комбинацион (ташқил қилувчи) частота	<b>st</b>	валент тебраниш

$\delta$	Деформацион тебраниш	$\gamma$	скелетли тебраниш
----------	----------------------	----------	-------------------

### 2.3. Турли органик бирикмалар синфига хос бўлган характеристик ИҚ-спектрлар.

#### 1) Алканлар



C-H<sub>st</sub> – турли интенсивликка эга бўлган бир нечта чизиклар бўлиши мумкин

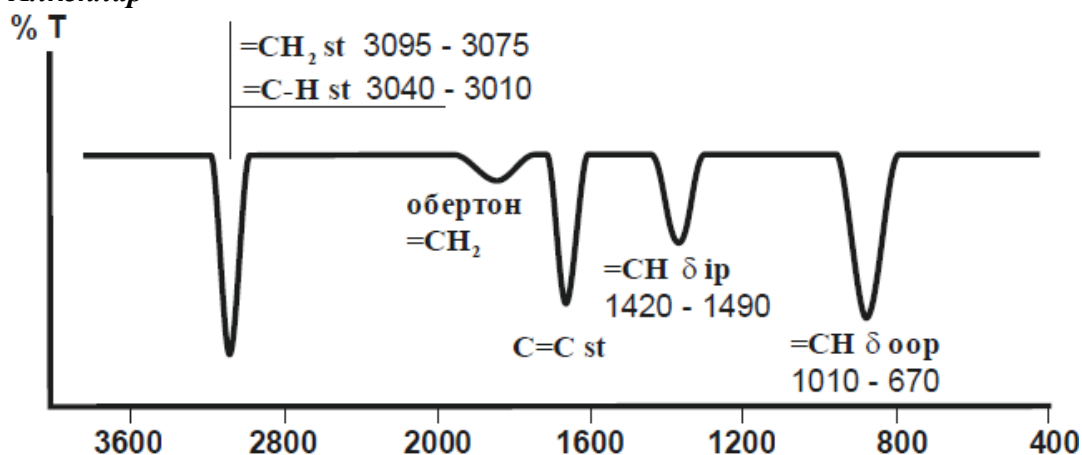
CH<sub>3</sub> δ<sub>as</sub> ва CH<sub>2</sub> δ – ўртача интенсив, бир-бирига мос келади

CH<sub>3</sub> δ<sub>s</sub> – ўртача интенсив, айрим ҳолларда иккига бўлиниб намоён бўлади

CH<sub>3</sub> γ – ўзгарувчан интенсив, амалий аҳамиятга эга эмас, бир нечта чизик кўринишида намоён бўлиши мумкин

CH<sub>2</sub> γ – ўртача интенсив, айрим ҳолларда иккита чизик.

#### 2) Алкенлар



CH=CH<sub>2</sub> – 1650–1635; 1005–985; 920–900 см<sup>-1</sup>.

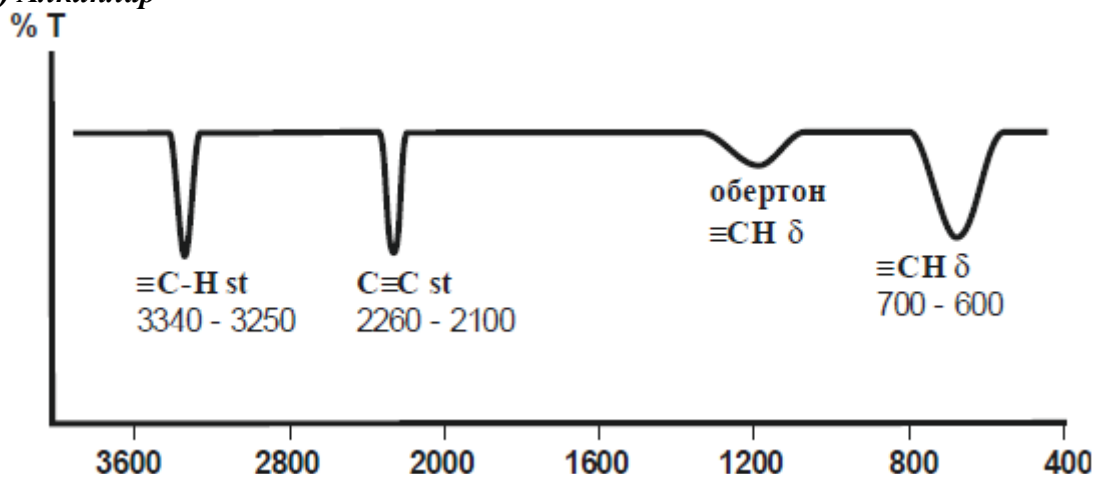
C=CH<sub>2</sub> – 1660–1640; 900–880 см<sup>-1</sup>.

транс -CH=CH- – 1690–1665; 990–960 см<sup>-1</sup>.

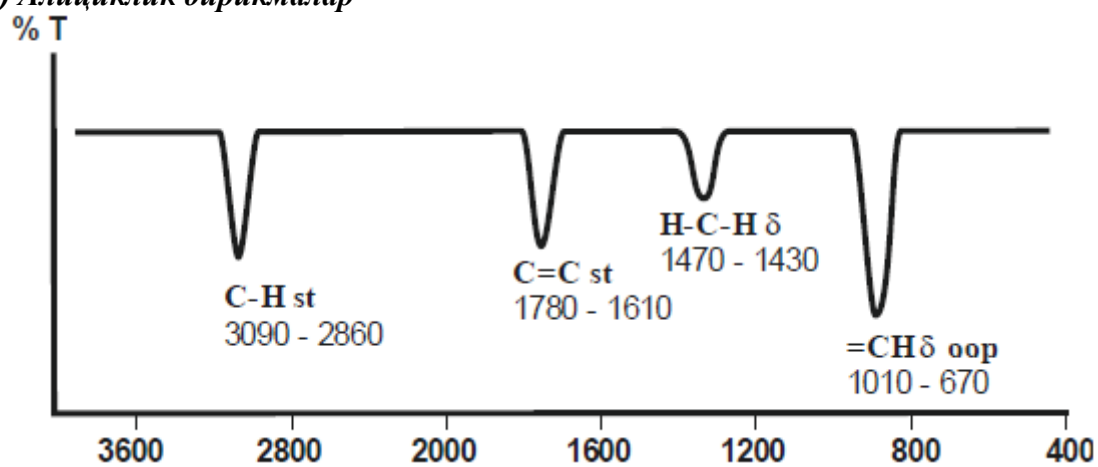
цис -CH=CH- – 1665–1635; 725–675 см<sup>-1</sup>.

транс >C=CH- – 1690–1660 (кучсиз); 840–800 см<sup>-1</sup>.

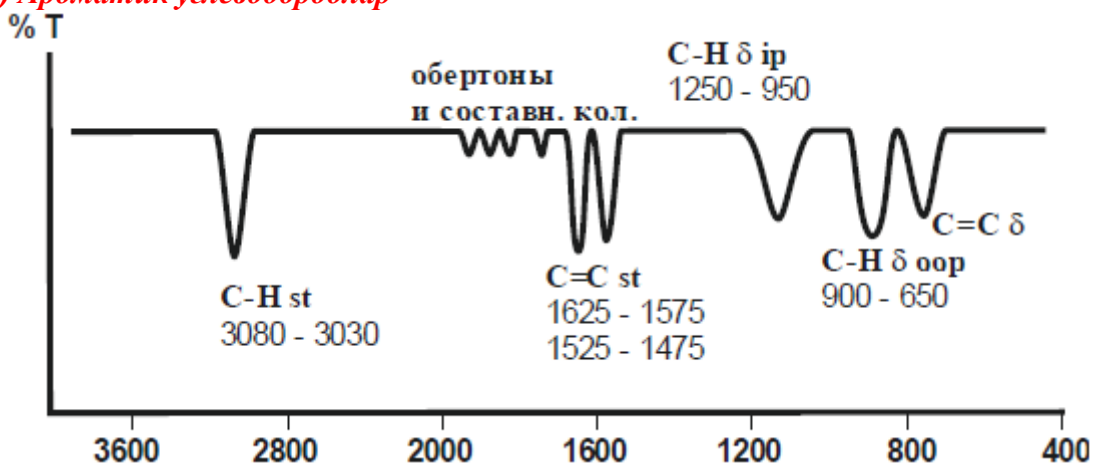
### 3) Алкинлар



### 4) Алициклик бирикмалар

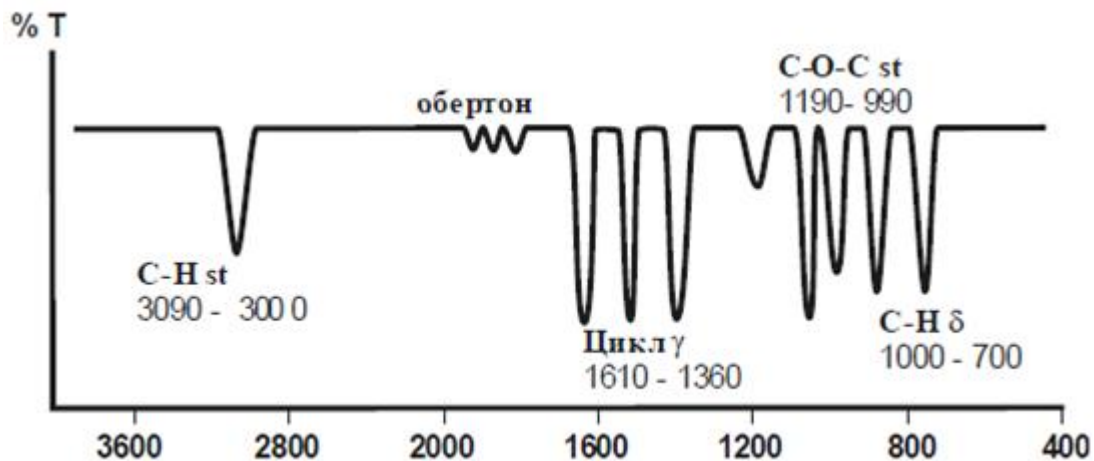


### 5) Ароматик углеводородлар

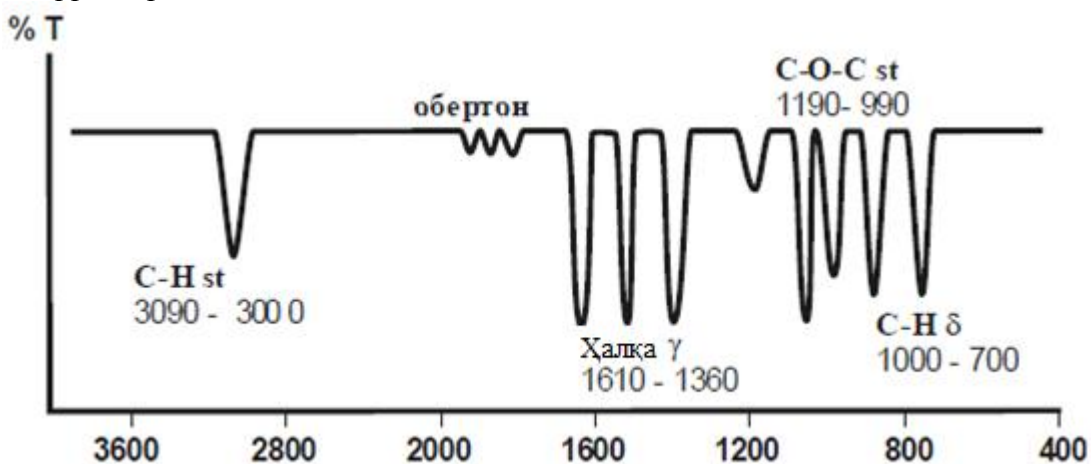


6) Гетероароматик бирикмалар

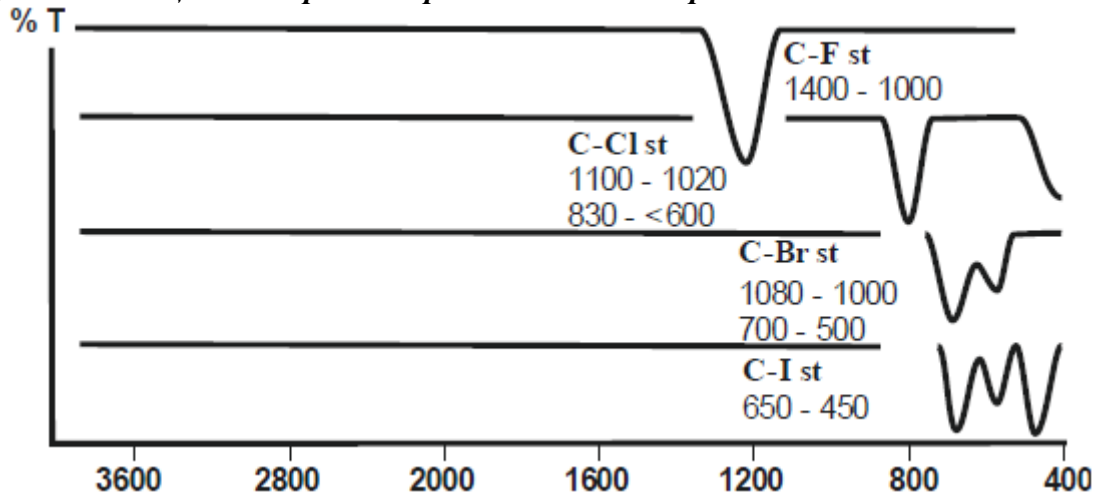
А) Фуранлар



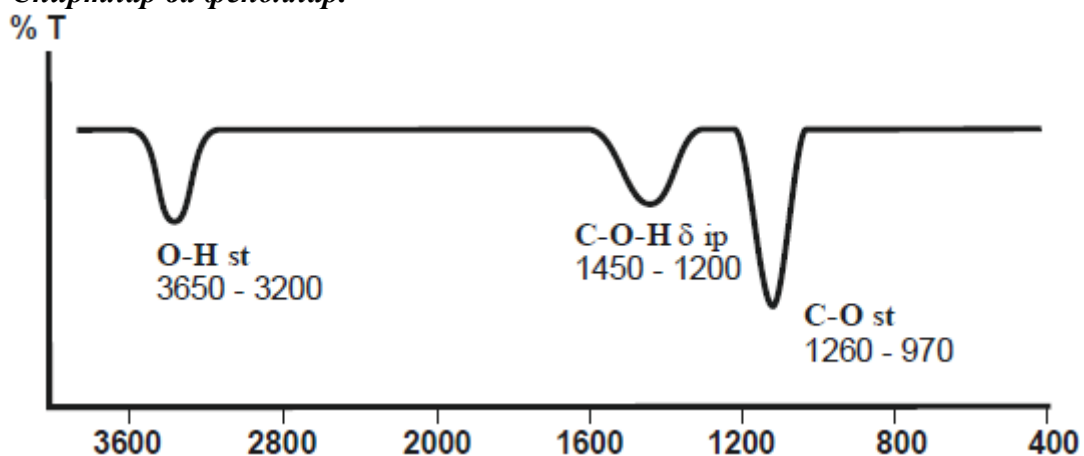
В) Пирролар



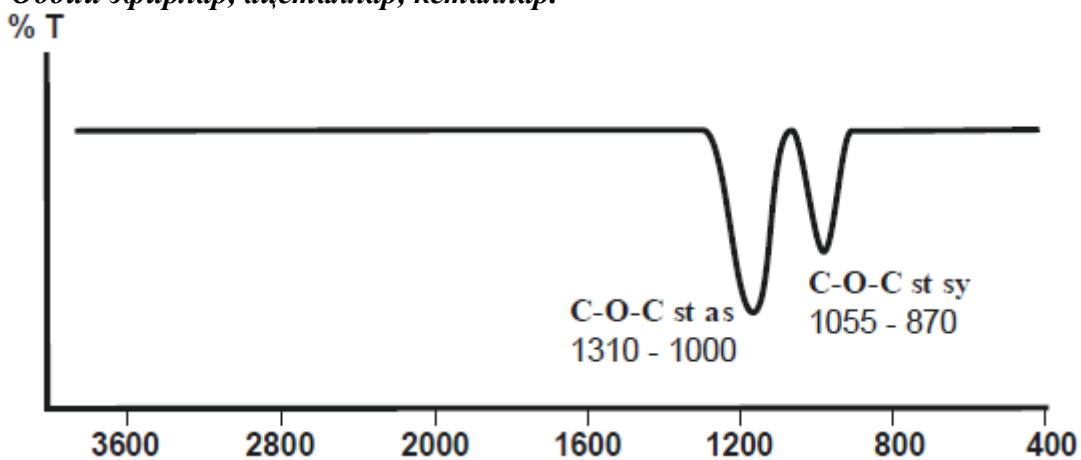
7) Галоген сақловчи бирикмалар. C-X боғнинг тебраниши.



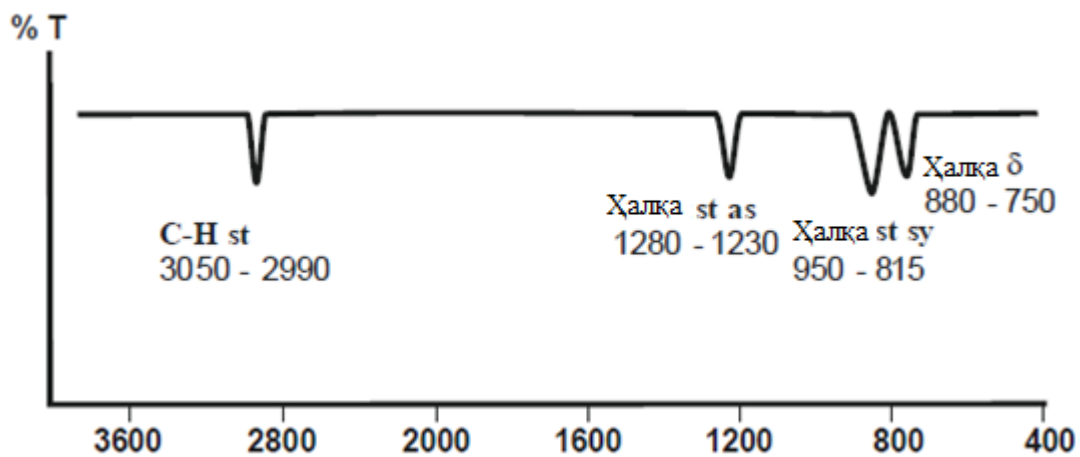
8) Спиртлар ва феноллар.



9) Oddiy эфирлар, ацеталлар, кеталлар.

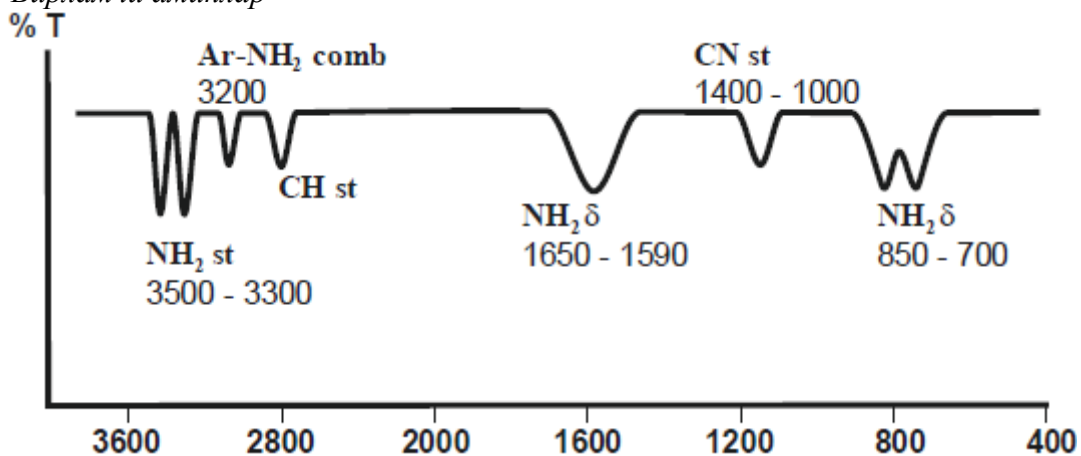


10) Эпоксидлар.

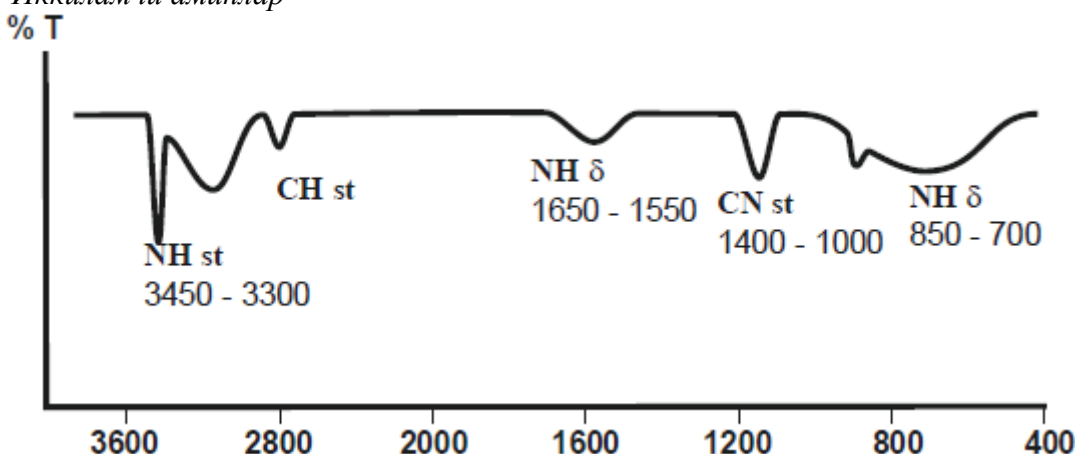


11) Аминобирикмалар.

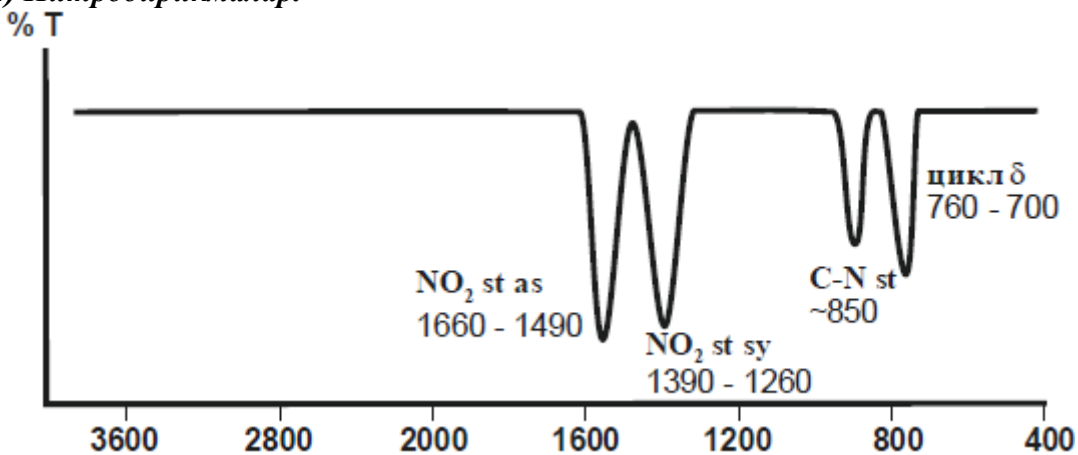
А) Бирламчи аминлар



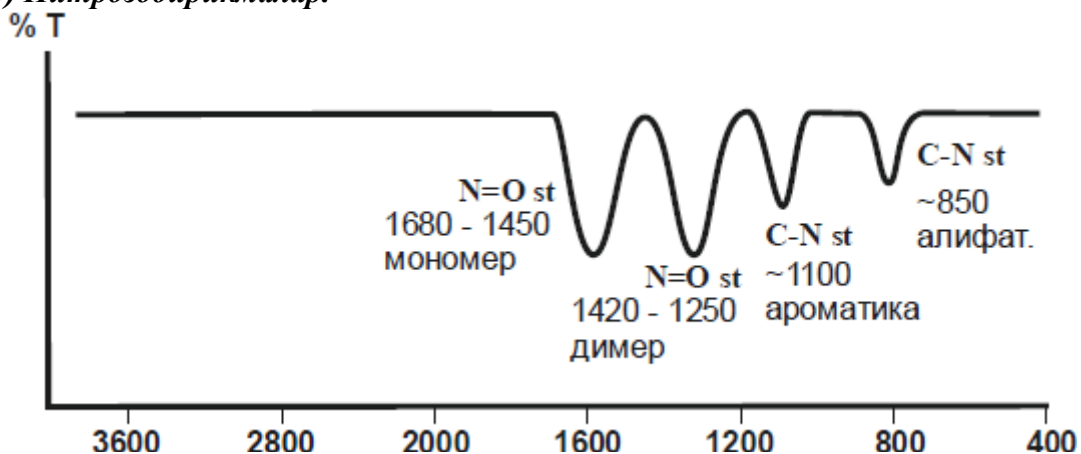
В) Иккиламчи аминлар



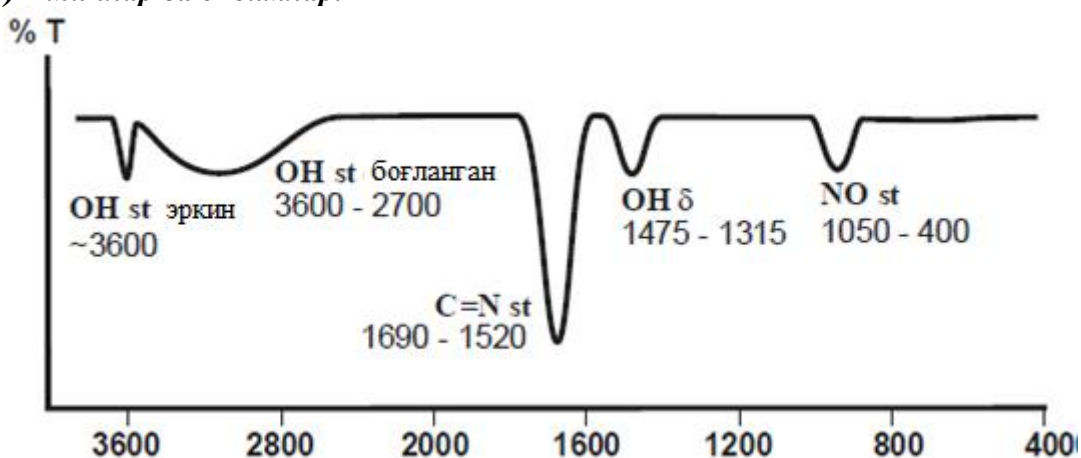
12) Нитробирикмалар.



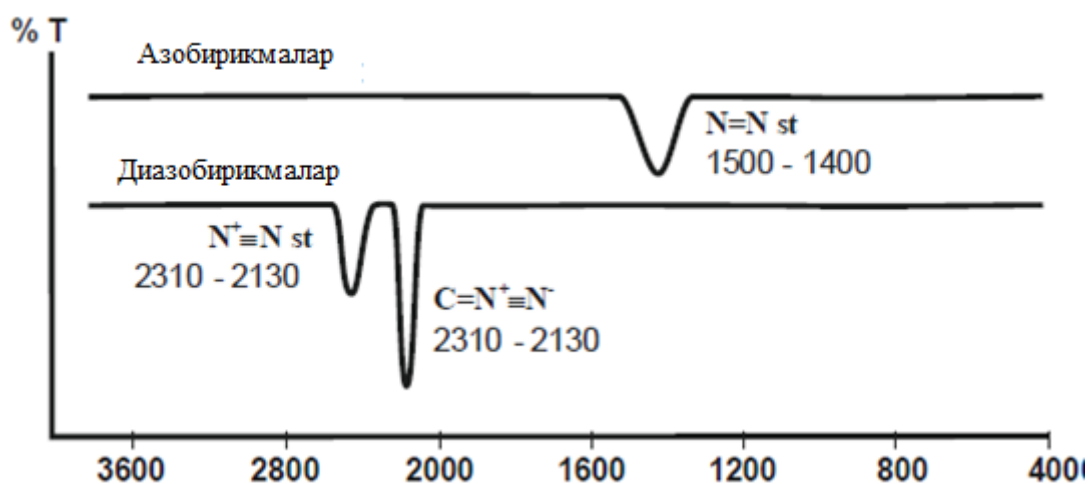
13) Нитрозобирикмалар.



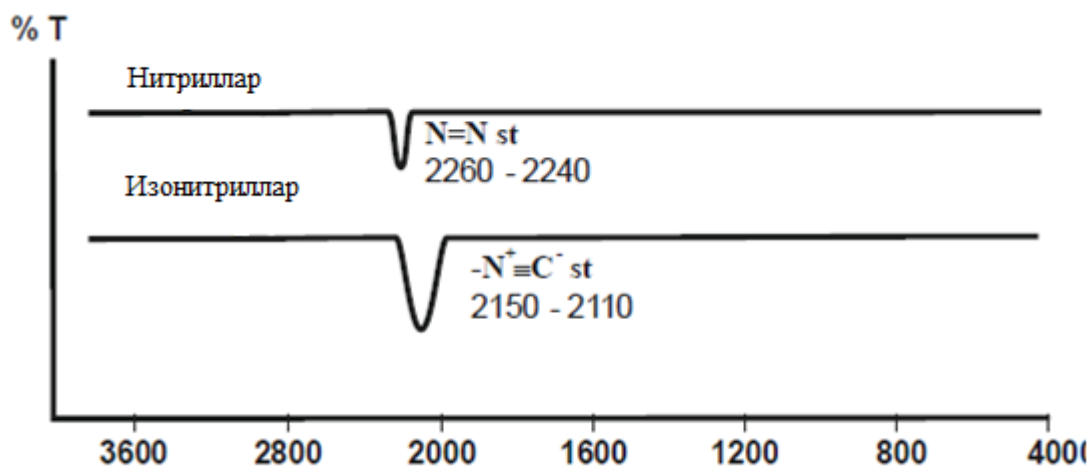
14) Иминлар ва оксимлар.



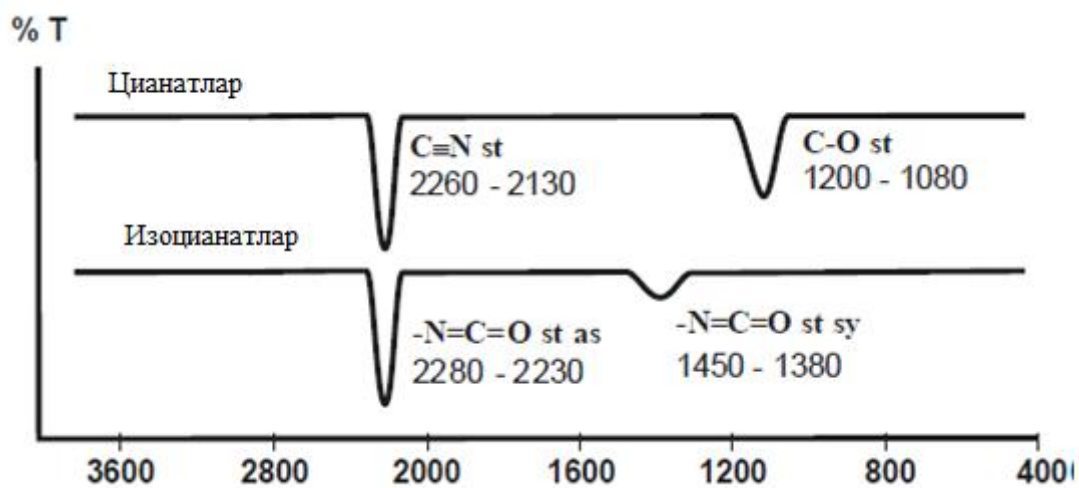
15) Азобирикмалар.



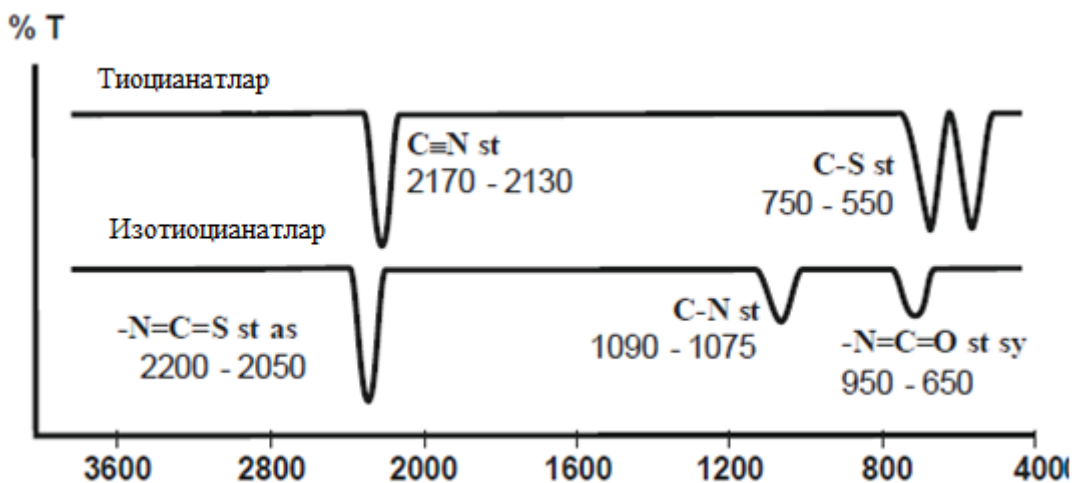
### 16) Нитриллар



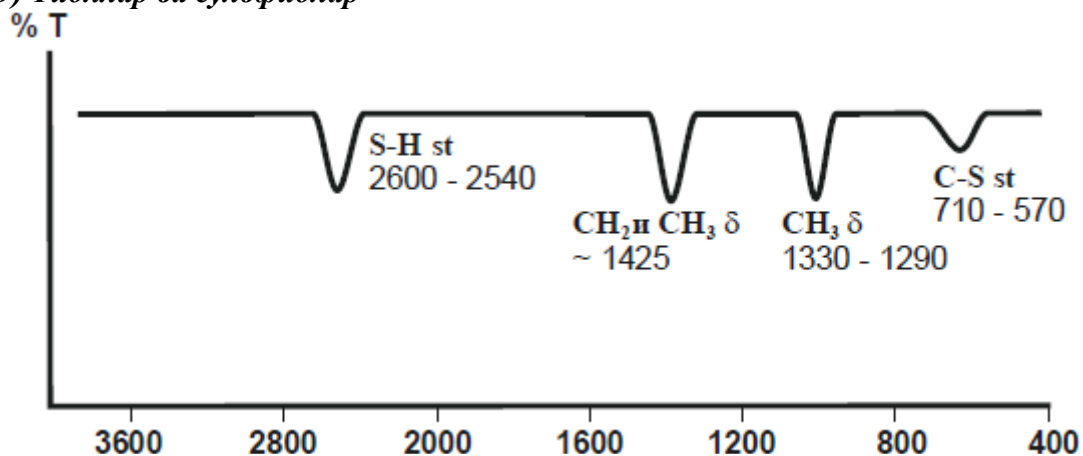
### 17) Цианатлар



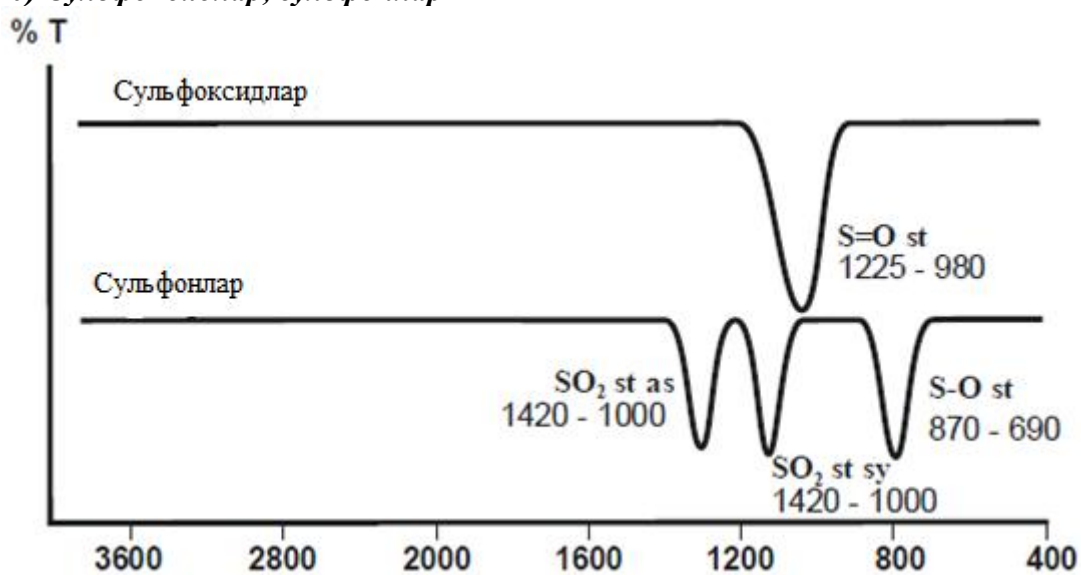
### 18) Тиоцианатлар



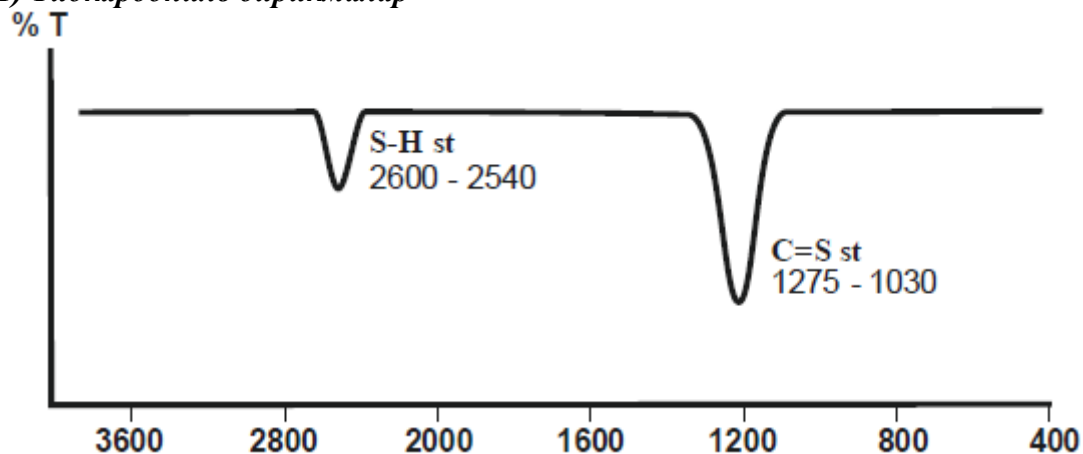
19) Тиоллар ва сульфидлар



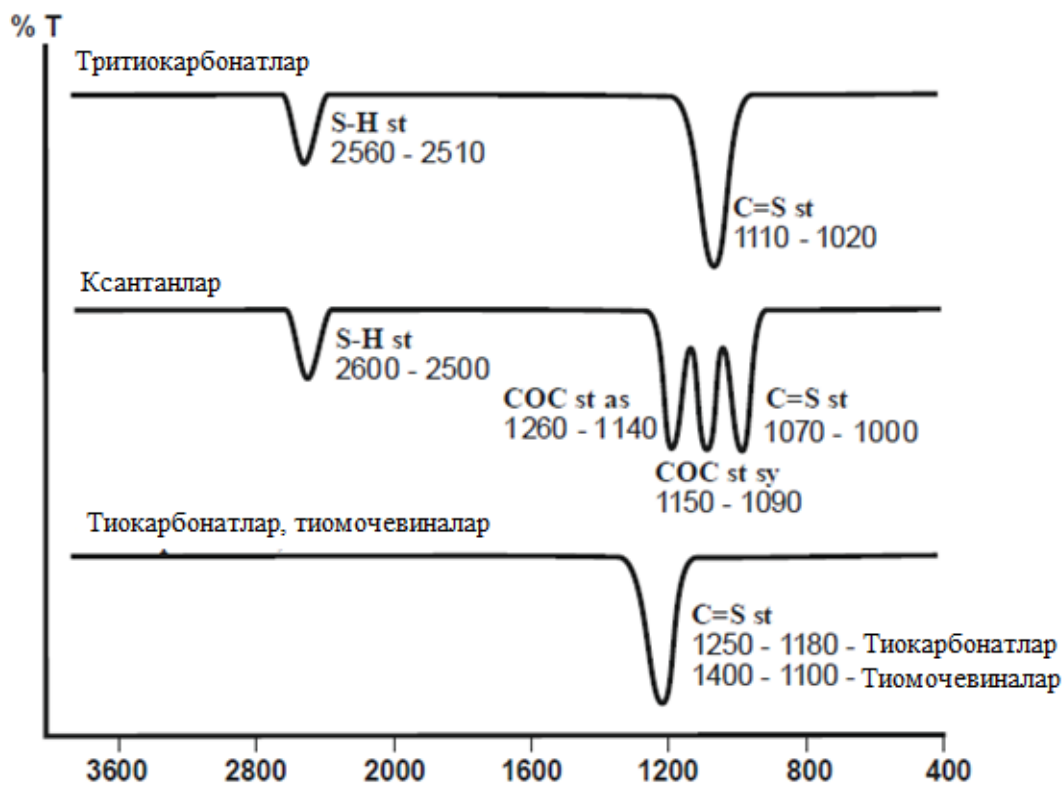
20) Сульфоксидлар, сульфонлар



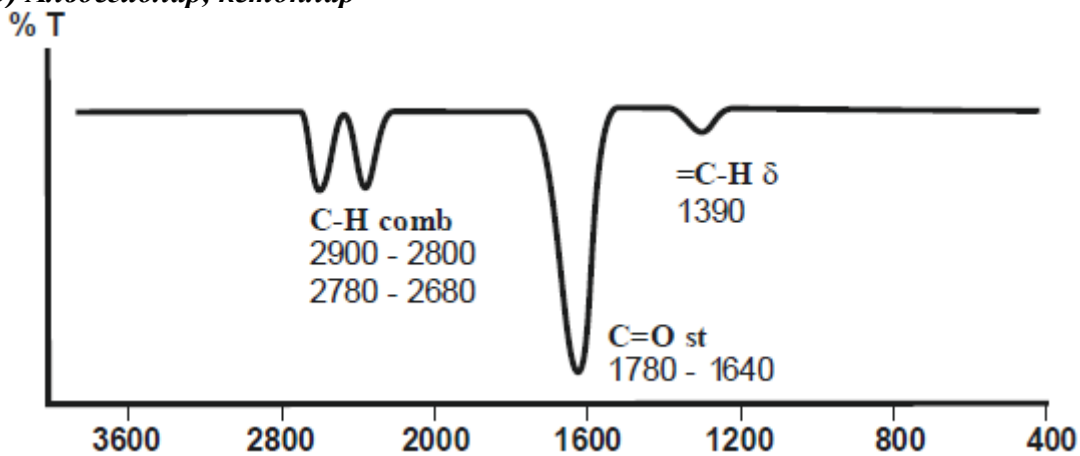
21) Тиокарбониль бирикмалар



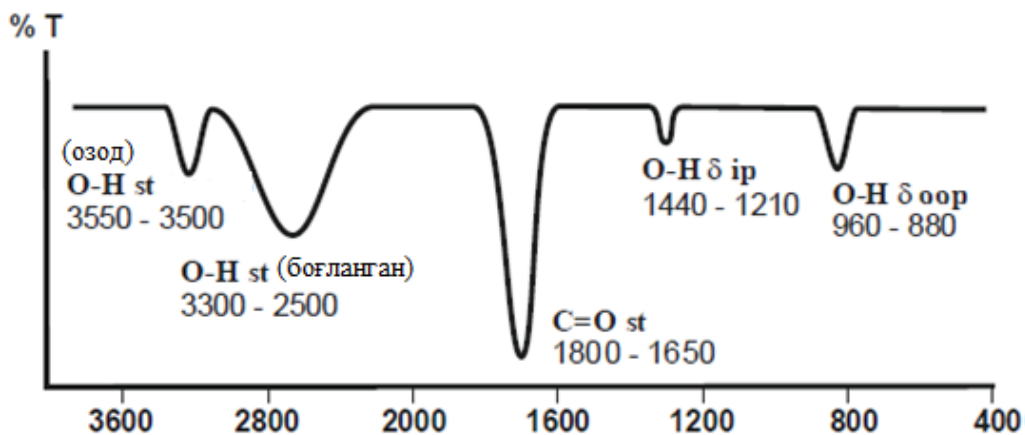
## 22) Тиокарбон кислота ҳосилалари



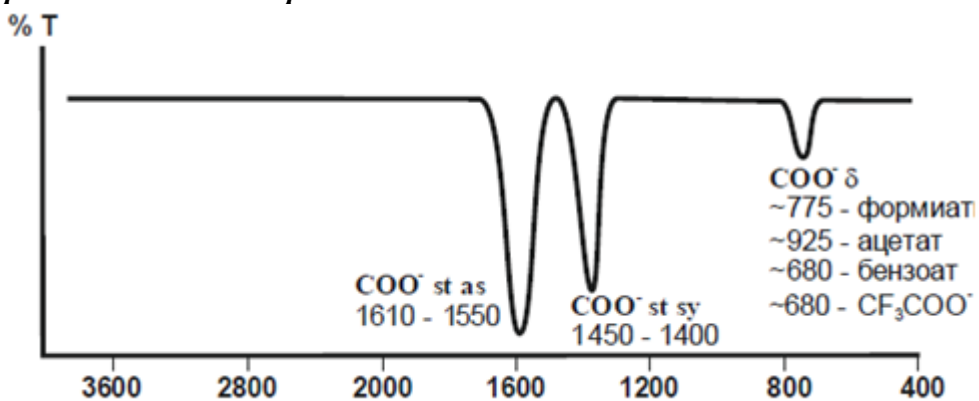
## 23) Альдегидлар, кетонлар



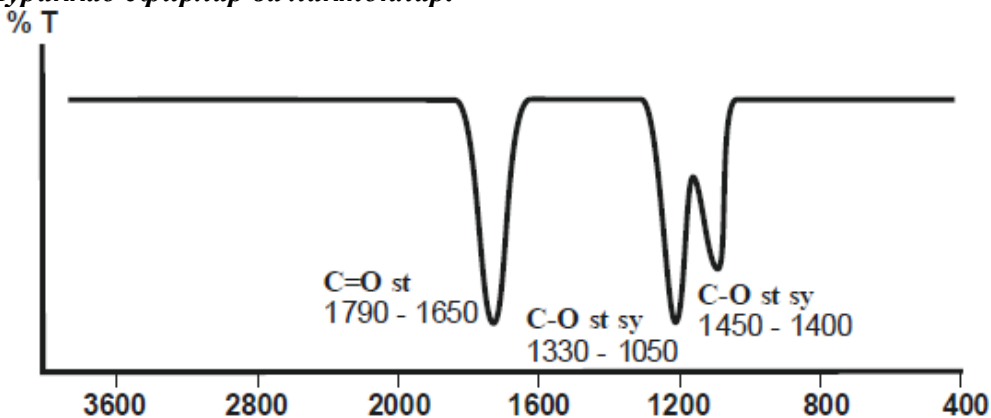
## 24) Карбон кислоталар.



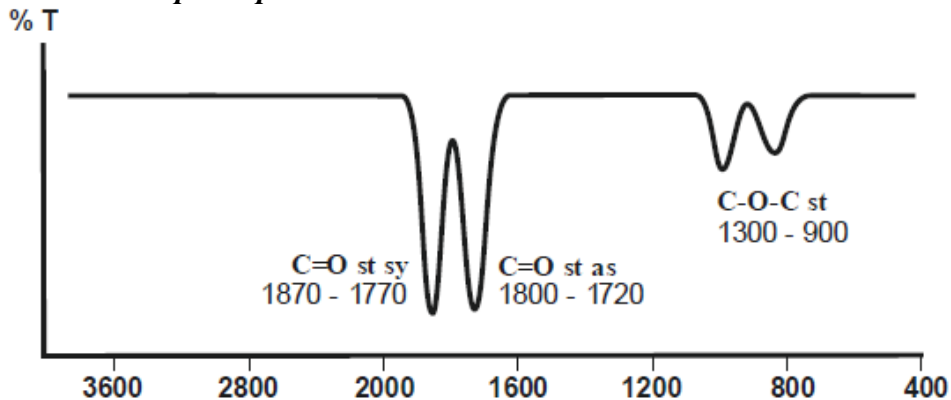
25) Карбоксилат-анионлар.



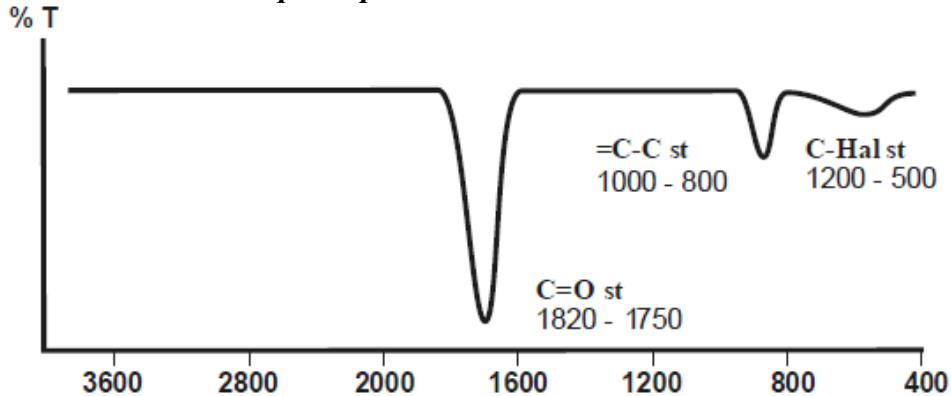
26) Мураккаб эфирлар ва лактонлар.



27) Кислота ангидридлари.

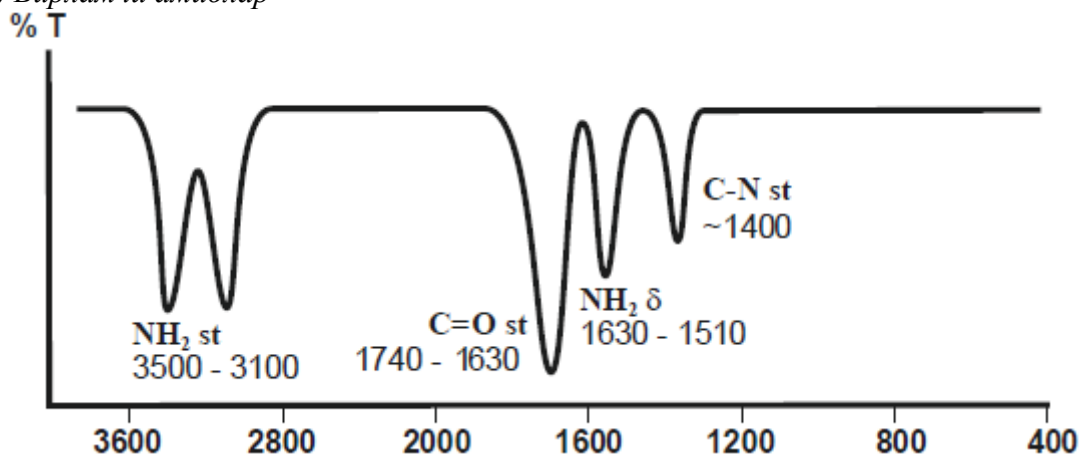


28) Кислота галогенангидридлари.

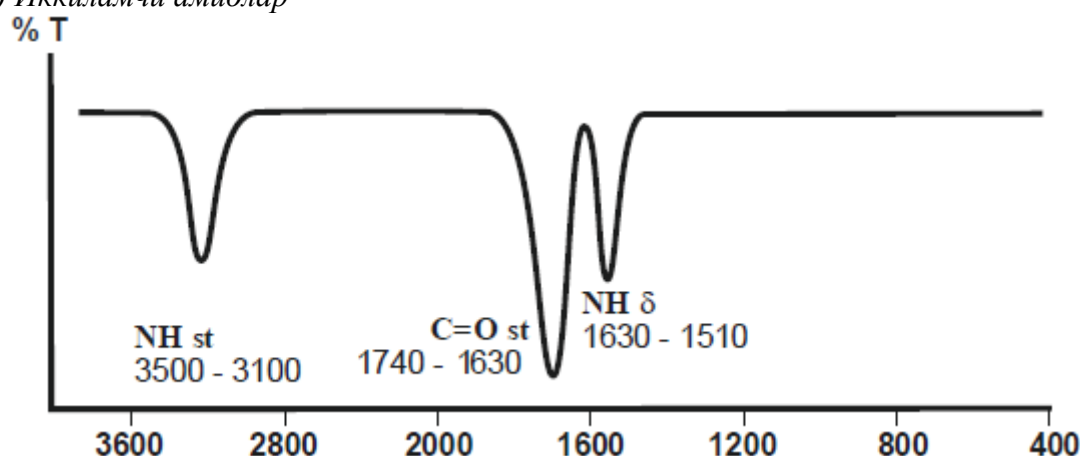


## 29) Амидлар

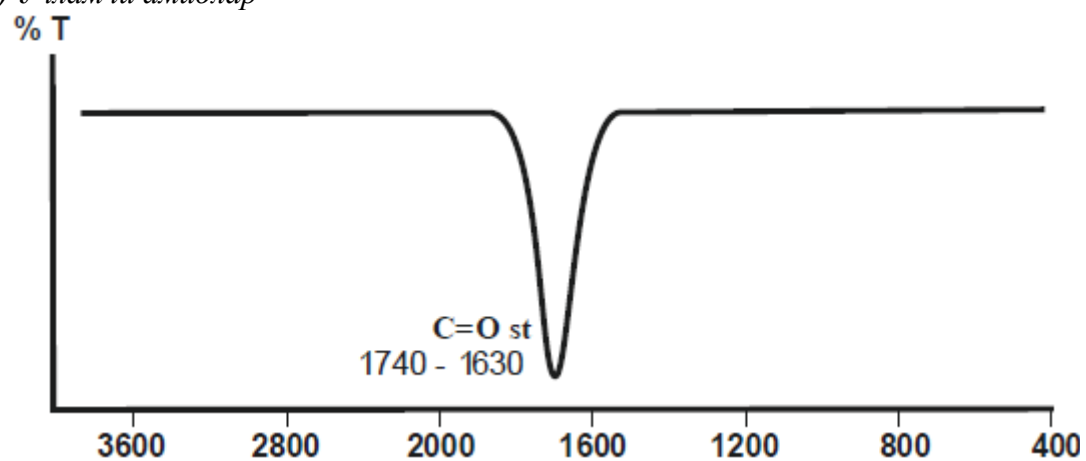
### A) Бирламчи амидлар



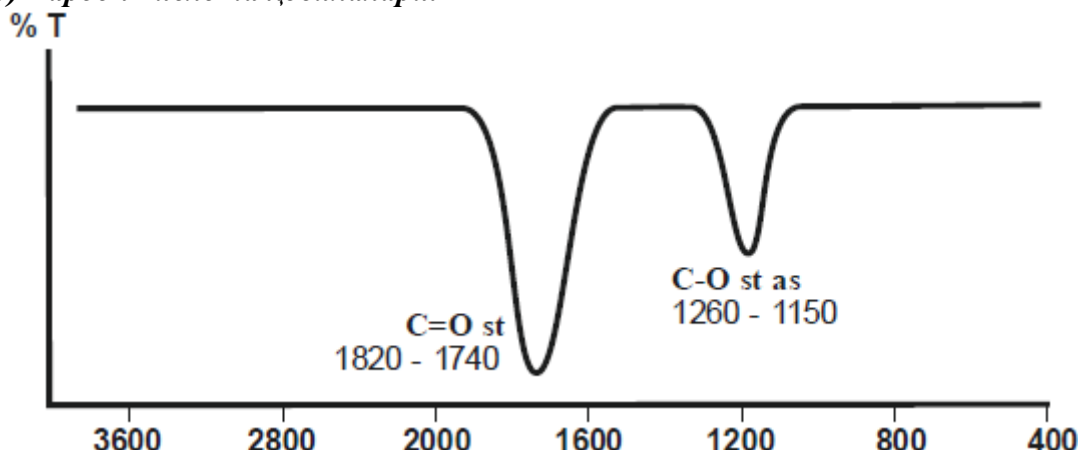
### B) Иккиламчи амидлар



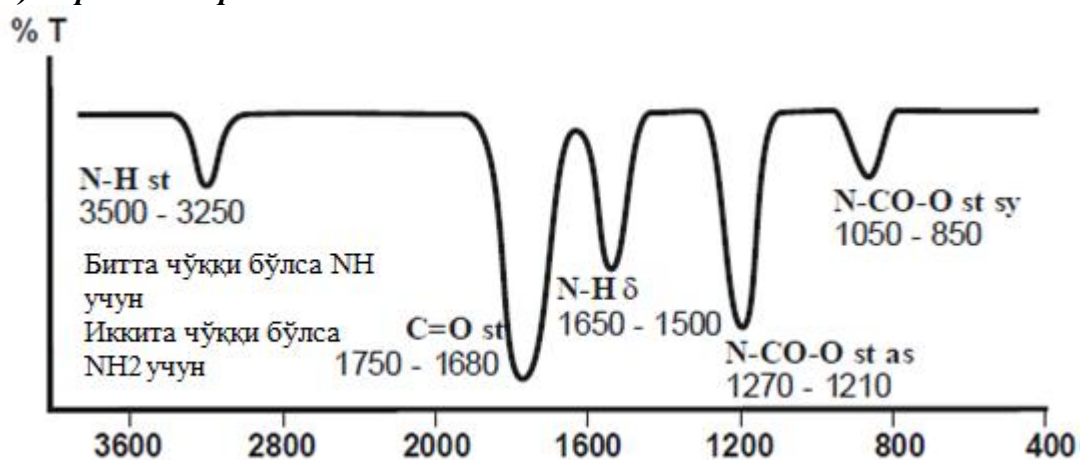
### C) Учламчи амидлар



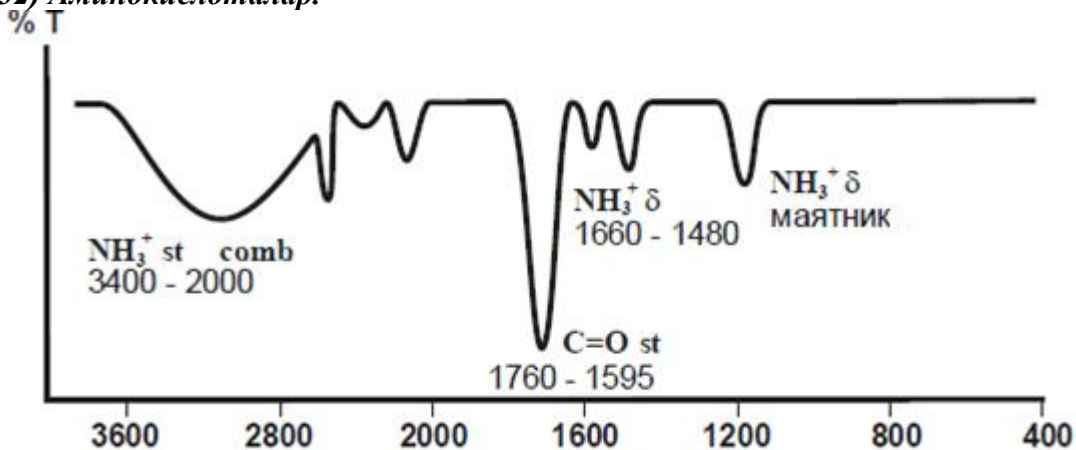
30) Карбон кислота ҳосилалари.



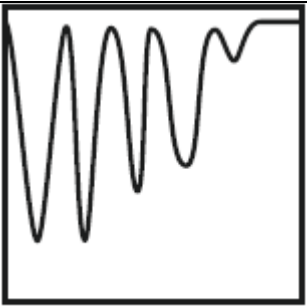
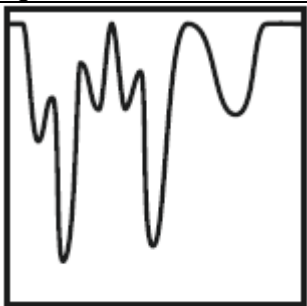
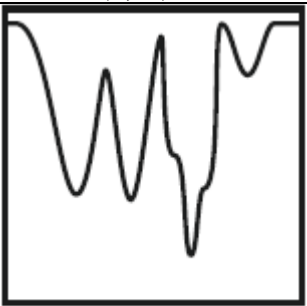
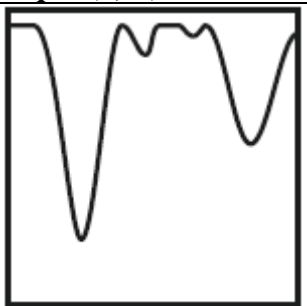
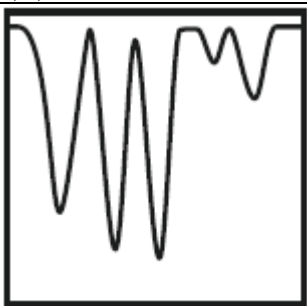
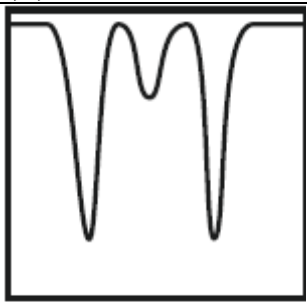
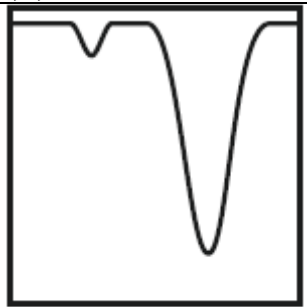
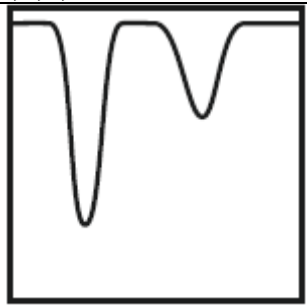
31) Карбаматлар

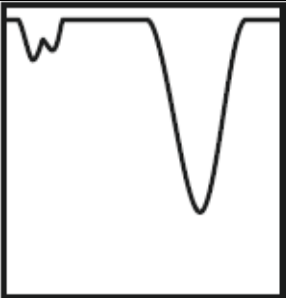
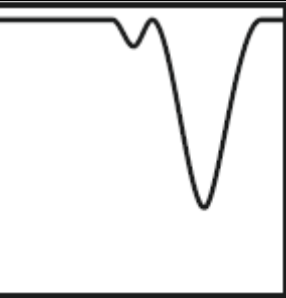




32) Аминокислоталар.



2.4. Ароматик ҳалқадаги алмашинган ўринбосарлар миқдорига боғлиқ равишда ИҚ-спектри. Ҳалқага кучли таъсир ўтказувчи ўринбосарлар (CO, CN, NO<sub>2</sub>) иштирокида бундай қонуният бузилиши мумкин.

Обертон	CН δ оор C=C (аром.)	Обертон	CН δ оор C=C (аром.)
<i>Моно-</i> 	≈900 770 – 730 710 – 690	<i>Орто- (1,2-)</i> 	770 – 730
<i>Мета- (1,3-)</i> 	900 – 860 865 – 810 810 – 750 710 – 690	<i>Пара- (1,4-)</i> 	860 – 780
<i>1,2,3-</i> 	800 – 770 780 – 760 720 – 685	<i>1,2,4-</i> 	900 – 860 860 – 800 730 – 690
<i>1,3,5-</i> 	900 – 840 865 – 800 730 – 675	<i>1,2,3,4-</i> 	(860) 810 – 780
<i>1,2,3,5-</i>		<i>1,2,4,5-</i>	

 <p data-bbox="308 448 595 481">2000 1600</p>	(900) 850 – 840	 <p data-bbox="903 448 1190 481">2000 1600</p>	(900) 870 – 850
<i>Пента-</i>		<i>Гекса-</i>	
 <p data-bbox="308 824 595 857">2000 1600</p>	900 – 840	 <p data-bbox="903 824 1190 857">2000 1600</p>	-

## Фойдаланилган адабиётлар

1. С.Ю.Вязьмин, Д.С.Рябухин, А.В.Васильев. Электронная спектроскопия органических соединений Санкт-Петербург, 2011
2. Л.В.Вильков, Ю.А.Пептин Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия, Учебное пособие, М., Высшая школа, 1987.
3. Ю. Бёккер. Спектроскопия. Москва: Техносфера, 2009. 528 с.
4. Л.А.Казицина, Н.Б.Куплетская. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектрологии в органической химии, М., Изд. МГУ, 1979.
5. Р.Сильверстейн, Г.Басслер, Т.Мориил. Спектроскопическая идентификация органических соединений, М., 1977.
6. Э.Преч, и др. Определение строения органических соединений. Таблица спектральных данных. М: Мир;2006. 438 с.
7. Н.М. Имашева. Спектральные методы определение строения органических соединений. Учеб;пособ. Астрахань. 2013. 84 с.
8. Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David Kiemle, David L. Bryce. Spectrometric Identification of Organic Compounds. USA. 2005. 550 p.
9. <http://www.chemistry.ssu.samara.ru/chem1/index1.htm>.
10. <http://www.freechemical.info/freeSoftware/kinds.php>
11. <http://www.chem.msu.ru/>

## МУНДАРИЖА

Кириш.....	3
Асосий спектроскопик таҳлил усуллари.....	4
УБ-спектроскопия.....	8
УБ-спектрофотометрнинг ишлаш принципи.....	10
Органик молекулаларнинг электрон спектрлари ва тузилиши ўртасидаги боғлиқлик.....	12
Хромофорлар ва ауксохромлар, хромофорларнинг туташуви.....	13
Электрон спектрларда ютилиш чизикларининг синфланиши.....	15
Органик бирикмаларни идентификациялашда УБ-спектроскопия усулидан фойдаланиш.....	17
Назорат учун саволлар.....	19
ИҚ-спектроскопия.....	21
ИҚ-спектроскопиянинг физик асослари.....	21
ИҚ-спектрофотометрнинг ишлаш принципи.....	24
Органик бирикмаларни идентификациялашда ИҚ-спектроскопия усулидан фойдаланиш.....	28
Назорат учун саволлар.....	40
Талабалар билимини назорат қилиш учун савол ва масалалар.....	44
Электрон спектроскопия.....	44
Тебранма спектроскопия.....	45
Бирикмани тузилишини унинг УБ спектри билан солиштириш.....	46
Моддани тузилишини унинг ИҚ спектри билан солиштириш.....	49
Электрон ва тебранма спектрлардан биргаликда фойдаланиш.....	51
Қўшимча маълумотлар.....	63
Фойдаланилган адабиётлар рўйхати.....	80