

**(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH MOLEKULUNUN TRANS-KONFERMERİNİN SANTİMETRİK VƏ MİLLİMETRİK FIRLANMA SPEKTRİ.****S.B.KAZIMOVA, M.E.ƏLİYEV, A.S.HƏSƏNOVA.***Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası**Fizika İnstitutu,**Azərbaycan, AZ-1143, Bakı prosp H. Cavid 33.*

(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun trans-konfermerinin fırlanma spektrinin tədqiqi 17300-79050 mHs diapazonunda davam etdirilmişdir. Fırlanma spektrinin nəzəri təfsiri Vatsonun A- reduksiya fırlanma Hamiltonianı ilə aparılıb. Fırlanma keçidlərinin identifikasiyası fırlanma kvant ədədi C –nin yüksək qiymətlərinədək (C≤35) davam etdirilib və molekulun spektroskopik sabitləri dəqiqləşdirilib.

Исследован вращательный спектр и идентифицирован 147 вращательных переходов транс-конформера молекулы (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH подающих в микроволновый диапазон. Уточнены вращательные и центробежные постоянные.

The rotational spectrum of a (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molecule in trans –conformation has been analyzed and 145 transitions have been identified. For the theoretical description of a rotational spectrum has been used the A- reduction Watson Hamiltonian, fitted spectroscopic parameters searched molecule.

(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektri millimetrik və santimetrik dalğa diapazonunda [1-2] işlərində tədqiq edilib. Məlum olduğu kimi izopropil molekulu uyğun olaraq ordinar C-C və C-D rabitələri ətrafında daxili fırlanmaya məruz qalan iki metil və bir hidrosil qrupundan ibarətdir. Bu molekulun müxtəlif konformerlərinin mövcudluğuna, onun fırlanma və fırlanma rəqsi spektrinin mürəkkəbliyinə səbəb olur. Bu da öz növbəsində fırlanma keçidlərinin identifikasiyasında böyük çətinlik törədir. Odur ki, (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun trans-konformerinin mikrodalğa spektrinin tədqiqinin davam etdirilməsi onun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin və həmçinin struktur parametrlərinin dəqiqləşdirilməsi nöqteyi-nəzərindən əhəmiyyətlidir

Fırlanma keçidlərinin identifikasiyasına başlamazdan əvvəl, ilk öncə (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun məlum mikrodalğa parametrləri əsasında onun fırlanma spektrinin təfsiri Vatsonun A-reduksiya Hamiltonianı ilə aparılmışdır. Düz spektroskopik məsələnin həlli verilmiş diapazonda bu molekulun kifayət qədər zəif xəttlərinin mövcudluğunu göstərdi. Bu zəif keçidlərin identifikasiyası edilməsi spektrin C-nin yüksək qiymətlərində interpretasiyasını asanlaşdırardı. Odur ki, qarşıya, birinci növbədə, bu zəif xəttlərin yazılması məsələsi çıxdı. Bu öz növbəsində spektrometrin həssaslığının artırılması zərurətini doğurdu.

Mikrodalğa spektrometrlərinin həssaslığının artırılması üçün adətən udma siqnallarının Ştark modulyasından istifadə olunur [3-4]. Zəif və çox zəif udma siqnallarının tədqiqi prosesində qarşıya ştark modulyasiyasının tezliyinin artırılması və unipolyar modulyasiya impulslarının amplitudunun artırılması hesabına spektrometrin həssaslığının artırmaq lazım gəldi. Bu məqsədlə elektrik molekulyar modulyasiyaya uyğun impuls düzləndiricisindən istifadə etdik. Spektrometrin element bazasının dəyişdirilməsi və Ştark generatorunun modelləşdirilməsi əsasında spektrometrin həssaslığını artırıdığımız ki, bu da spektral xəttlərin ölçmə dəqiqliyini yüksəltdi [5].

Bu bizə (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun mikrodalğa diapazonunda çox zəif udma xəttlərini ölçməyə imkan verdi və spektral xətlərin ölçmə dəqiqliyini artırdı. Bu xəttlərin identifikasiyasına başlamazdan əvvəl, əvvəlki işlərdən məlum olan spektroskopik parametrlər [2] əsasında tədqiq olunan molekulun spektrini Vatsonun A- reduksiya fırlanma Hamiltonianı ilə 11<sup>r</sup> koordinat təsvirində təhlil etdik.

Təyin etdiyimiz spektroskopik sabitlər əsasında tədqiq olunan diapazona düşən fırlanma keçidlərinin tezlikləri və onların təyin olunma xətalrı (spektroskopik sabitlərin korrelyasiyası nəzərə alınmaqla ortakvadratik xətlər ) hesablandı. Sonra isə tərs spektroskopik məsələnin həllinə ardıcıl olaraq tezlikləri təcrübi ölçülmüş keçidlərdən xətləri minimal olanları daxil etdik. Hər dəfə tərs spektroskopik məsələyə yeni tezliklər daxil etdikdən sonra düz spektroskopik məsələ həll olunub və sonra əməliyyat davam etdirilib.

Beləliklə, fırlanma kvant ədədi C=35-dək 145 fırlanma keçidini identifikasiya etməyə nail olduq.

Yeni identifikasiya olunmuş keçidlərin tezlikləri Cədvəl 1-də verilmişdir.

Fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin- tezliklərin Vatsonun A-reduksiya fırlanma Hamiltonianı ilə hesablanmış qiymətlərinin santimetrik və millimetrik dalğa diapazonunda təcrübi ölçülmüş qiymətlərinə ən kiçik kvadratlar metodu ilə yaxınlaşdırılması ilə 11<sup>r</sup> koordinat təsvirində təyin olunmuş- qiymətləri və onların təyin olunma xətləri Cədvəl 2-də verilmişdir. Müqaisə üçün bu cədvəldə bu sabitlərin [2] işində təyin olunmuş qiymətləri və həmçinin onların təyin olunma xətləri də verilmişdir. Cədvəldən də görüldüyü kimi bu işdə təyin olunmuş sabitlərin xətləri [2] işində təyin olunmuş sabitlərin xətlərindən ən azı bir tərtib kiçikdir.

Cədvəl 3-də Vatsonun A-reduksiya fırlanma Hamiltonianının sabitlərinin korrelyasiya matrisası verilmişdir.

(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun yeni identifikasiya olunmuş fırlanma keçidlərinin tezlikləri

Keçid							V <sub>təc.</sub>	V <sub>hesa.</sub>	Δv
1							2	3	4
2	1	1	-	1	0	1	25054.83	25054.70	0.12
3	2	2	-	2	1	1	32853.51	32853.37	0.14
3	1	2	-	2	2	1	28414.86	28414.89	-0.03
3	1	3	-	2	1	2	25933.36	25933.26	0.14
4	4	1	-	3	3	1	54688.53	54688.33	0.20
4	2	2	-	3	1	3	62131.50	62131.67	-0.17
4	1	3	-	4	0	4	17483.64	17483.56	0.08
4	3	2	-	3	1	3	65595.73	65595.87	-0.13
4	2	2	-	3	0	3	62188.00	62187.81	0.19
5	3	3	-	4	2	2	54209.26	54209.21	0.05
5	4	2	-	4	3	1	62429.54	62429.39	0.15
5	4	1	-	4	3	1	64462.57	64462.49	0.08
5	2	3	-	4	1	3	63671.26	63671.14	0.11
5	5	0	-	5	3	3	31371.99	31371.87	0.12
5	4	1	-	4	4	0	54236.85	54236.65	0.19
5	5	0	-	6	1	6	22608.68	22608.54	0.15
6	2	5	-	5	1	4	54712.43	54712.30	0.13
6	3	3	-	5	4	2	59227.82	59227.79	0.03
6	1	5	-	5	2	4	54623.09	54623.05	0.03
6	6	1	-	6	5	2	19284.97	19284.98	-0.01
6	6	0	-	6	5	2	19327.45	19327.37	0.08
6	1	6	-	5	1	4	26767.00	26766.99	0.01
6	1	6	-	5	1	5	49539.58	49539.37	0.21
7	5	2	-	6	6	1	58766.61	58766.57	0.04
7	5	3	-	6	6	0	54664.34	54664.25	0.09
7	5	3	-	7	4	4	19111.59	19111.40	0.19
7	5	2	-	6	6	0	58724.04	58724.17	-0.13
7	3	4	-	6	4	2	64408.56	64408.48	0.08
7	3	4	-	6	6	0	34378.69	34378.76	-0.07
7	0	7	-	6	0	6	57369.89	57369.85	0.05
7	6	1	-	6	6	1	74500.06	74499.89	0.17
8	3	5	-	8	2	6	27179.85	27180.05	-0.20
8	2	6	-	8	1	7	32842.26	32842.22	0.04
8	5	3	-	7	6	2	74287.24	74287.25	-0.01
8	1	7	-	7	2	6	70313.66	70313.81	-0.15
8	6	3	-	7	7	1	62382.71	62382.58	0.13

**S.B.KAZIMOVA, M.E.ƏLİYEV, A.S.HƏSƏNOVA.**

Cədvəl 1-in davamı

1							2	3	4
8	5	4	-	7	6	1	64091.34	64091.22	0.12
8	2	6	-	7	2	5	75495.58	75495.77	-0.19
9	7	3	-	8	8	0	69653.29	69653.43	-0.14
9	6	3	-	9	3	6	57227.92	57227.81	0.11
9	7	2	-	9	4	5	47740.78	47740.58	0.20
9	4	5	-	9	3	6	26315.55	26315.50	0.05
9	9	0	-	9	7	3	55180.26	55180.49	-0.23
9	7	3	-	9	3	6	72913.95	72914.16	-0.21
9	3	6	-	9	3	7	32509.05	32509.19	-0.14
9	4	5	-	8	6	2	69150.64	69150.83	-0.19
9	4	6	-	9	2	7	32577.68	32577.81	-0.12
10	5	6	-	10	2	8	69948.07	69948.01	0.06
10	5	6	-	10	4	7	32223.02	32223.19	-0.17
10	9	2	-	10	8	3	28877.64	28877.49	0.15
10	8	3	-	10	7	4	25072.21	25072.28	-0.07
10	9	2	-	10	8	2	28364.34	28364.43	-0.09
10	3	8	-	9	4	6	58520.08	58520.07	0.01
10	5	6	-	10	3	7	32236.08	32235.91	0.17
10	3	8	-	9	3	6	58586.24	58586.36	-0.12
11	9	2	-	11	8	3	25990.85	25990.81	0.04
11	8	3	-	11	7	4	17725.03	17724.99	0.04
11	5	6	-	11	5	7	31082.28	31082.13	0.15
11	7	4	-	11	5	7	69354.21	69354.08	0.13
11	8	3	-	10	10	0	57841.67	57841.81	-0.14
11	11	1	-	11	9	2	69135.68	69135.76	-0.08
11	3	9	-	11	1	10	48230.24	48230.23	0.01
12	8	5	-	12	5	7	59517.21	59517.24	-0.03
12	6	6	-	12	5	7	29747.83	29747.82	0.01
12	7	5	-	12	6	6	20477.52	20477.47	0.05
12	9	4	-	12	8	4	21030.90	21030.90	0.00
12	11	2	-	12	10	2	35943.54	35943.42	0.12
12	8	4	-	11	10	1	74946.42	74946.41	0.01
12	8	5	-	12	6	6	29769.33	29769.43	-0.10
13	7	6	-	13	6	7	27668.44	27668.42	0.02
13	11	3	-	13	10	3	34426.88	34426.76	0.12
13	11	3	-	13	9	4	61518.62	61518.48	0.14
13	10	3	-	13	8	6	60203.21	60202.98	0.23
13	9	5	-	12	11	2	72231.14	72230.96	0.18
13	9	4	-	13	7	7	64496.72	64496.52	0.19
13	4	9	-	12	6	6	58355.47	58355.55	-0.08
14	11	3	-	14	10	4	31892.34	31892.44	-0.10
14	5	9	-	14	4	10	47363.31	47363.24	0.07

**(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH MOLEKULUNUN TRANS-KONFERMERİNİN SANTİMETRİK VƏ MİLLİMETRİK FIRLANMA**

Cədvəl 1-in davamı

1							2	3	4
15	9	7	-	15	8	8	35640.84	35640.66	0.18
15	2	14	-	15	1	15	73943.32	73943.40	-0.08
15	9	7	-	15	7	8	36069.27	36069.14	0.13
15	3	12	-	15	3	13	63389.14	63389.35	-0.22
16	10	6	-	16	9	7	21177.22	21177.12	0.10
16	9	7	-	16	8	8	29972.11	29972.13	-0.02
16	12	5	-	16	11	6	36245.02	36244.97	0.05
16	12	5	-	16	10	6	55655.37	55655.18	0.19
16	2	14	-	17	0	17	17190.40	17190.52	-0.12
17	7	11	-	17	6	12	57369.89	57369.84	0.05
17	12	6	-	17	11	7	35939.60	35939.75	-0.15
17	12	5	-	17	10	8	73910.04	73910.15	-0.11
18	9	10	-	18	8	11	51093.20	51093.38	-0.18
18	6	12	-	18	5	13	62555.91	62556.00	-0.09
18	14	5	-	18	12	6	75642.06	75641.99	0.06
19	7	12	-	19	6	13	62160.71	62160.81	-0.10
19	9	10	-	19	8	11	50202.94	50202.76	0.18
19	19	0	-	19	18	1	65627.28	65627.24	0.04
19	11	8	-	19	10	9	31860.83	31860.92	-0.09
19	6	14	-	19	4	15	73171.55	73171.52	0.02
20	20	0	-	20	19	2	69208.15	69208.06	0.09
20	17	4	-	20	16	4	55628.33	55628.45	-0.12
20	18	2	-	20	17	3	60391.93	60391.82	0.11
20	11	10	-	20	9	11	49704.35	49704.42	-0.07
21	18	3	-	21	17	4	59305.20	59305.31	-0.11
21	18	4	-	21	17	4	59305.20	59305.09	0.11
21	19	2	-	21	18	4	64010.21	64010.21	0.00
22	13	9	-	22	12	11	78351.15	78351.06	0.09
22	12	11	-	22	11	12	54252.15	54252.26	-0.11
22	18	4	-	22	17	5	57979.61	57979.73	-0.12
22	9	13	-	22	8	14	66436.55	66436.41	0.14
22	10	13	-	22	9	14	66438.90	66438.97	-0.07
23	17	6	-	23	16	7	49589.07	49589.08	-0.01
23	15	8	-	23	14	9	28922.53	28922.69	-0.16
23	10	14	-	23	9	15	71700.39	71700.46	-0.07
23	11	13	-	23	10	14	65856.08	65856.06	0.02
23	9	14	-	23	8	15	71700.08	71699.94	0.14
23	14	9	-	23	13	11	71684.83	71684.94	-0.11
23	0	23	-	22	2	21	72926.30	72926.38	-0.08
24	13	11	-	24	12	12	50409.85	50409.68	0.17
24	1	24	-	23	1	22	75645.73	75645.71	0.02
24	5	20	-	23	7	17	28881.45	28881.41	0.03
24	13	11	-	24	13	12	50101.86	50101.96	-0.11

1				2			3			4		
25	16	10	-	25	15	10	18026.13	18026.15	-0.02			
26	19	8	-	26	18	9	56585.43	56585.48	-0.05			
26	13	14	-	26	12	15	69862.80	69862.71	0.09			
27	12	15	-	27	11	16	75261.80	75261.73	0.07			
27	13	15	-	27	12	16	75265.88	75265.98	-0.10			
27	14	13	-	27	14	14	61964.25	61964.48	-0.23			
28	16	13	-	28	14	14	61605.18	61604.97	0.21			
28	17	11	-	28	17	12	29022.03	29021.81	0.22			
29	19	11	-	29	18	11	31865.30	31865.31	-0.01			
29	18	11	-	29	17	12	34331.95	34332.10	-0.15			
29	6	23	-	28	8	20	48477.34	48477.41	-0.07			
29	7	23	-	28	9	20	48477.34	48477.41	-0.07			
29	18	12	-	29	16	13	57834.93	57834.91	0.02			
30	20	10	-	30	19	12	59208.96	59208.95	0.01			
30	16	15	-	30	14	16	72789.12	72789.27	-0.16			
31	15	16	-	31	14	17	78349.97	78349.93	0.04			
31	21	10	-	31	20	11	51000.48	51000.59	-0.11			
31	15	16	-	31	15	17	78347.59	78347.71	-0.13			
32	22	11	-	32	21	11	56537.87	56537.82	0.05			
32	20	13	-	32	19	14	58802.91	58802.97	-0.06			
32	18	15	-	32	17	16	70572.06	70572.17	-0.11			
32	22	10	-	32	21	12	62802.36	62802.30	0.06			
33	23	11	-	33	22	11	62751.02	62750.97	0.05			
34	22	13	-	34	21	14	60675.99	60675.89	0.10			
34	23	11	-	34	22	12	57136.77	57136.67	0.10			
35	25	10	-	35	24	11	72951.43	72951.48	-0.05			

Burada  $\Delta v = v_{\text{tec.}} - v_{\text{hes.}}$

Cədvəl 2

(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri

SABITLƏR	IŞ [2]	BİZİM IŞDƏ
A (MHs)	7035.7587 (0.0040)	7035.7705 (0.0013)
V (MHs)	6006.3329(0.0040)	6006.3449 (0.0011)
S (MHs)	3915.4308 (0.0040)	3915.4440 (0.0008)
$\Delta_J$ (kHs)	2.8000 (0.0354)	2.8855 (0.0011)
$\Delta_{JK}$ (kHs)	-1.8033 (0.0106)	-1.8158 (0.0009)
$\Delta_K$ (kHs)	2.8158 (0.0081)	2.8285 (0.0008)
$\delta_J$ (kHs)	-0.9410 (0.0016)	-0.9400 (0.0003)
$\delta_K$ (kHs)	-0.3352 (0.0031)	-0.3319 (0.0003)

Cədvəl 3

(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH molekulunun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri və onların korrelyasiya matrisası

SPEKTROSKOPIK SABITLƏR	KORRELYASIYA MATRISASI
A = 7035.7705 MHs	
B = 6006.3449 MHs	0.89
C = 3915.4440 MHs	0.89 0.94
$\Delta_J$ = 2.8855 kHs	0.59 0.73 0.71
$\Delta_{JK}$ = -1.8158 kHs	0.20 0.07 0.23 -0.03
$\Delta_K$ = 2.8285 kHs	-0.25 -0.07 -0.13 0.15 -0.91
$\delta_J$ = -0.9400 kHs	-0.31 -0.60 -0.53 -0.86 -0.07 -0.07
$\delta_K$ = -0.3319 kHs	0.32 0.33 0.28 0.35 0.64 -0.67 -0.48
$\sigma$ = 0,109244	

- [1]. *Ч.О.Каджар, С.А.Мусаев, Э.Ю.Салаев* Центробежное возмущение во вращательном спектре молекулы (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH. Оптика и спектроскопия, 1983, т. 55, № 4, с. 648-652.
- [2]. *Ч.О.Каджар, С.А.Мусаев, Э.Ч.Саидов* Вращательный спектр транс-конформера молекулы (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CDOH в сантиметровом и миллиметровом диапазонах длин волн. FIZIKA, 2001, т. 7, № 2, с. 25-31.
- [3]. *Ч.О.Каджар, С.А.Мусаев, Э.Ю.Салаев, Г.М. Аскеров* Изв. АН Азербайджана, сер. ФТМН, 1979. N 1, с.100
- [4]. *Ч.Таунас, А.Шавлов* Радиоспектроскопия. М. Изд-во иностр. лит., 1959. с.756
- [5]. *Ч.О.Каджар, С.А.Мусаев, А.А.Абдуллаев, М.Е.Алиев* Формирователь импульсов для электрической молекулярной модуляции. Приборы и техника эксперимента, 2005, №2, с.95-97.

*Daxil olunub: 01.07.2007*