



KVANT-KIMYOSINING USULLARIDAN FOYDALANIB SPEKTRAL NATIJALARNI TAHLIL QILISH

Sherzodjon To'liqino'g'li Ahmedov
Chirchiq davlat pedagogika universiteti
sherzodbek.ahmedov8883@gmail.com

Annotatsiya: *Aromatik uglevodorodlardan – benzol va brombenzol suyuqliklari Raman spektroskopiyasi yordamida 0-5000 cm⁻¹ chastota diapazonida o'rganildi. Molekulalarning turli chastotalar diapazonida tebranish rejimlari va ularning spektral kontur shakliga qo'shgan hissasi kvant-kimyosining yarim empirik usuli yordamida tahlil qilindi. Kvant-kimyoviy hisoblashlar uchun ORCA dasturiy ta'minoti imkoniyatlari ko'rsati berildi. Benzol va brombenzol potensial to'siqlarini hisoblash uchun yarim empirik usuldan foydalanish imkoniyati ko'rsatilgan.*

Kalit so'zlar: *Raman spektroskopiyasi, ab initio, benzol, brombenzol, tebranish rejimlari, potensial to'siq.*

АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Ароматические углеводороды - бензольную и бромбензольную жидкости исследовали методом рамановской спектроскопии в диапазоне частот 0-5000 см-1. Колебательные моды молекул в различных частотных диапазонах и их вклад в форму спектрального контура анализировались полуэмпирическим методом квантовой химии. Были продемонстрированы возможности программы ORCA для проведения квантово-химических расчетов. Показана возможность использования полуэмпирического метода для расчета потенциальных барьеров бензола и бромбензола.

Ключевые слова: *рамановская спектроскопия, ab initio, бензол, бромбензол, колебательные моды, потенциальный барьер.*

KIRISH

Tebranma harakat spektroskopiyasi moddalarning suyuq holatini o'rganishning samarali eksperimental usullaridan biridir. Suyuqliklarda yorug'likning sochilishini o'rganish muhitda sodir bo'ladigan jarayonlar haqida juda muhim ma'lumotlarni olish imkonini beradi. Suyuq fazadagi moddalarning tebranish spektrlaridagi konturlarning shakli molekulalarning orientatsion harakati bilan ham, molekula ichidagi tebranishlar energiya relaksatsiyasi dinamikasi bilan ham aniqlanadi [1-3].

Suyuq muhitda Raman spektrlarida molekulalararo o'zaro ta'sirlar mavjudligi sababli molekula ichidagi tebranishlar chastotalarining siljishi kuzatiladi, spektral chiziqlar shaklining o'zgarishi (bundan tashqari, ular tarqalgan yorug'likning



qutblanishiga qarab farqlanadi), molekuladagi atomlarning ba'zi va bir xil tebranishlar spektral chiziqlarining bo'linishi, kontur chiziqlar depolarizatsiya koeffitsientining o'zgarishi bilan yuzaga keladi va hokazo.

Ushbu o'zaro ta'sirlarning dinamik tabiati suyuqliklarning tebranish spektrlaridagi chiziqlarning kengayishiga sabab bo'ladi. Suyuqlikda turli komplekslar va assotsiatsiyalar hosil bo'lishi bilan bog'liq bo'lgan nisbatan uzoq muddatli lokal tartibning mavjudligi molekula ichidagi tebranishlar chastotalarining o'zgarishida namoyon bo'ladi [4-5].

Bu o'zgarishlarning barchasi suyuq muhitdagi molekulyar jarayonlar bilan bog'liq. Ushbu molekulyar jarayonlarning yorug'lik sochilishidagi spektrlarda namoyon bo'lish mexanizmlari haqidagi savol suyuqliklarning tuzilishi va ulardagi molekulyar jarayonlar haqidagi savol kabi juda muhim ahamiyat kasb etadi.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

Ushbu masalani hal qilish, bir tomondan, yorug'likning materiya bilan o'zaro ta'sirining tafsilotlarini, yorug'likning materiya bilan o'zaro ta'sirida elektromagnit to'lqinlar parametrlarining o'zgarishi mexanizmlarini tushunishda, ikkinchi tomondan, suyuqlikning tuzilishi va xususiyatlari, shuningdek molekulalararo ta'sirlashuvlar haqida qo'shimcha ma'lumot olish imkonini beradi [6-9].

Olingan natijalarni maxsus nazariy tahlilsiz izohlash ancha qiyin, kvant kimyosining usullaridan foydalanib, molekulalar atomlarining elektron tuzilishi, spektrlar hosil bo'lish mexanizmlari va boshqa xossalari tavsiflash mumkin [10].

Kvant kimyosi bu nazariy kimyoning kvant mexanikasi tushunchalari va usullari asosida kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalari, ularning o'zaro ta'siri va kimyoviy reaksiyalardagi o'zgarishlari ko'rib chiqiladigan bo'limi. Kvant kimyosining usullaridan foydalanib, molekulalar atomlarining elektron tuzilishi, spektrlari va boshqa xossalari tavsiflash mumkin. Ushbu muammolarni hal qilish uchun ko'p atomli tizim uchun Shredinger tenglamasi ko'rib chiqiladi. n ta elektron va yadro zaryadi Z bo'lgan ko'p elektronli atomning Gamiltoniani quyidagi shaklda bo'ladi:

$$H = \sum_{i=1}^n T_i + \sum_{i=1}^n V_{zi} + \sum_i \sum_{<j}^n V_{ij}, \quad (1)$$

bu yerda T_i – elektronlarning kinetik energiyasi, V_{zi} – elektronning yadro bilan o'zaro ta'sirining potentsial energiyasi, V_{ij} elektronlarning o'zaro ta'sirining potentsial energiyasi.

Atomning umumiy energiyasi quyidagi ifodadan aniqlanadi:

$$E = 2 \sum_{i=1}^n H_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (2J_{ij} - K_{ij}), \quad (2)$$

bunda $H_i = \int \Psi_i [T_i + V_{zi}] d\tau$ - bosh integral, i - orbitaldagi elektronning kinetik energiyasi va uning yadro bilan ta'sir potentsial energiyasi yig'indisini ifodalaydi;

$J_{ij} = \iint \Psi_i^2 V_{ij} \Psi_j^2 d\tau_i d\tau_j$ - Kulon integralidir, ya'ni i va j orbitallarda joylashgan elektronlarning elektrostatik itarilishining o'rtacha energiyasi,

$$K_{ij} = \int \Psi_i(1) \Psi_j(1) V_{ij} \Psi_i(2) \Psi_j(2) d\tau_i d\tau_j$$
 almashinuv integralidir.

Ψ_i orbital joylashuvni topish uchun variatsion prinsipdan foydalaniladi. Funktsionallik minimumini aniqlab,



$$\Phi = E - \sum_i \sum_j \varepsilon_{ij} \int \Psi_i \Psi_j d\tau \quad (3)$$

Xartri-Fok tenglamalarini olamiz

$$H_i(1)(1) + \sum_{j=1}^n (2\Psi_i(1) \int \Psi_i^2(2) V_{12} d\tau_2 - \Psi_j(1) \int \Psi_j(2) \Psi_i(2) d\tau_2) = \varepsilon_i \Psi_i(1) \quad (4)$$

Elektron strukturani hisoblashning eng oddiy turi ab initio Xartri-Fok (HF) sxemasi bo'lib, u elektron-elektron o'rtasidagi Kulon itarilishni hisobga olmaydi. Hisoblashda faqat uning o'rtacha ta'siri (o'rtacha maydon) kiritilgan. Bu variatsion protsedura; shuning uchun tizimning to'lqin funksiyasi bilan ifodalangan natijaviy taxminiy energiyalar har doim aniq energiyaga teng yoki undan katta bo'ladi va bazaning o'lchami kattalashgan sari Xartri-Fok chegarasi deb ataladigan cheklovchi qiymatga moyil bo'ladi [12-14]. Ko'p turdagi hisoblar Xartri-Fok hisobi bilan boshlanadi va keyinchalik elektron-elektron repulsiyasi uchun moslashtiriladi, bu elektron korrelyatsiya deb ham ataladi.

Xartri-Fok metodi elektronlarning orbitalarda qanday joylashishiga qarab turli usullarda amalga oshirilishi mumkin. Xartri-Fok metodi atom orbitalarini analitik shaklda olish mumkin emasligi sababli analitik yaqinlashuvlar taklif etiladi.

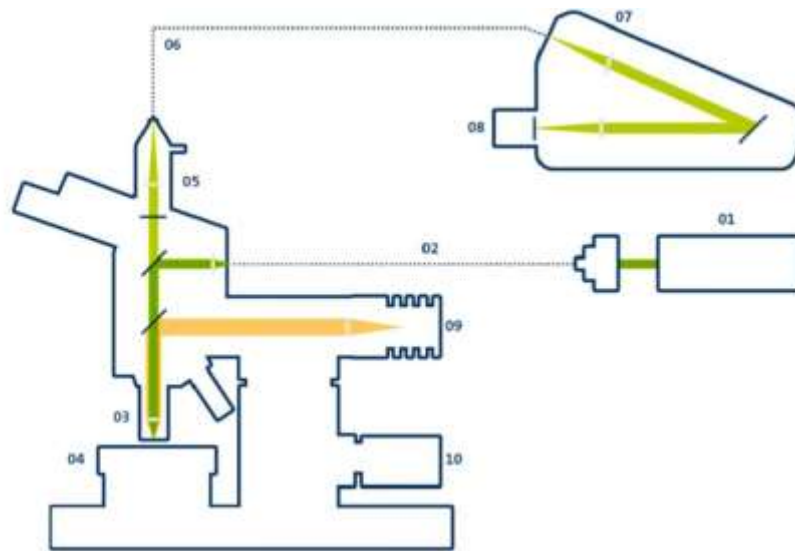
Molekulyar orbitallarni ifodalash uchun foydalaniladigan xususiyatlar to'plami "Bazislar to'plami" deb ataladi.

$$\Psi_i = c_{i1}\varphi_1 + c_{i2}\varphi_2 + \dots + c_{in}\varphi_n, \quad (5)$$

Ψ_i - molekulyar orbital, φ_j - ba'zi bazislar to'plamining funktsiyalari (bazis). c_{ij} kengayish koeffitsientlari uchun $i = 1, 2, \dots, n$ (n - bazaviy to'plam funktsiyalari soni) o'ziga mos keladigan maydon tenglamalarini yechish orqali topiladigan variatsion parametrlardir. Eng oddiy holatda, kengayishda φ_j asosiy holatda elektronlar egallagan atom orbitalarining to'lqin funktsiyalari. Bunday bazis to'plami minimal bazis deb ataladi. Bazis to'plami funktsiyasini aniqlashning turli usullari mavjud [15-18].

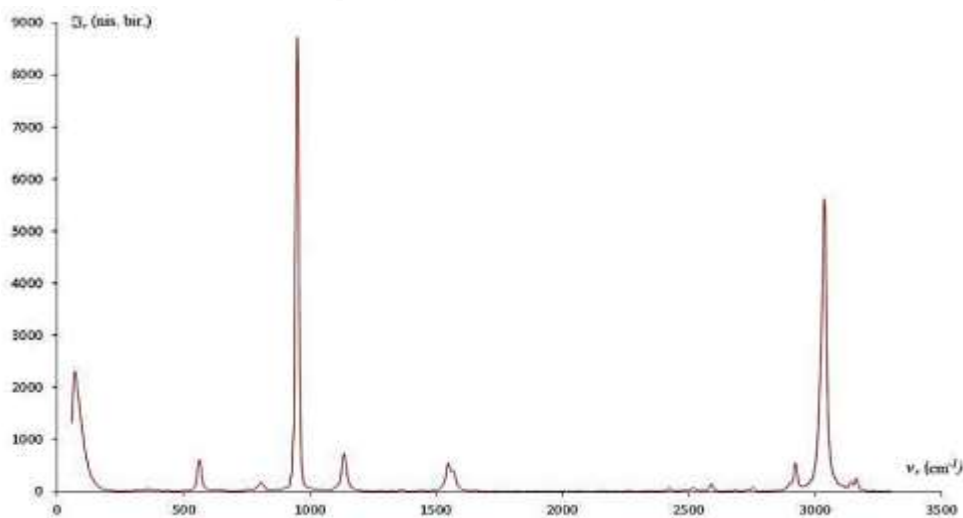
TAJRIBA

Raman spektrlari STR250 lazerli Raman spektrometri yordamida konfokal mikroskop bilan qayd etilgan. Bu yuqori sezuvchanlikka ega bo'lgan juda ixcham moslashuvchan tizim bo'lib, zaif Raman sochilish spektrlarini qayd qilish uchun ishlatilishi mumkin. Eksperimental o'rnatish sxemasi 1-rasmda keltirilgan.

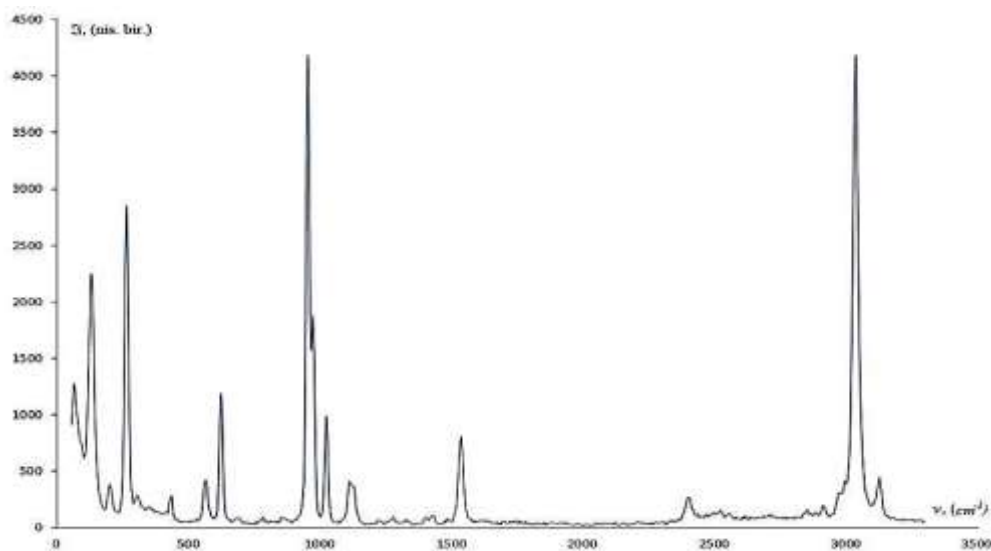


1-rasm. Raman spektrlarini qayd qilish uchun eksperimental qurilma sxemasi: 01 - lazer; 02, 06 – quvvati 90% gacha bo'lgan optik tolali kabel; 03 - sozlangan obyektiv; 04 – mikroskop stoli; 05 - filtrlar to'plami; 07 – STR250 spektrometri; 08 - piezoelektrik detektor; 09 - oq yorug'lik; 10 - vintli fokuslash

O'rnatish $50-7000 \text{ cm}^{-1}$ spektral diapazonda skanerlash mexanizmiga ega, fokus uzunligi 250 mm bo'lgan spektrometrdan (07) iborat bo'lib, uch xil avtomatik o'zgaruvchan diffraksiyon panjaralar (1 mm uchun 600; 1200; 1800 ta chiziq), o'lchamlari 1 cm^{-1} va CCD (08) kamera -60° C haroratgacha sovutadi. Shuningdek, u fazoviy ruxsati $<1 \text{ mm}$ bo'lgan kichik namuna uchun optik mikroskopni (03) va ko'rinadigan soha uchun (532 nm) qo'zg'atuvchi lazerni (01) o'z ichiga oladi.



2-rasm. Suyuq benzolning Raman spektri



3-rasm. Suyuq brombenzolning Raman spektri

Raman spektrlari tushayotgan nurga nisbatan 180° C burchak ostida qayd etilgan. O'rganilayotgan ob'ektlar [24] da tasvirlangan protseduralarga muvofiq yaxshilab tozalandi.

NATIJARLAR VA MUHOKAMA

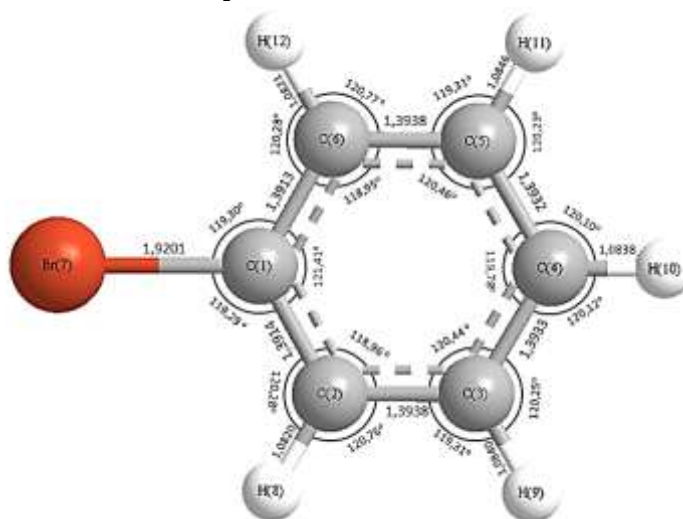
Olingan natijalarni solishtirish maqsadida ikkita GAUSSIAN va ORCA kvant-kimyoviy dasturiy paketlarida barcha o'rganilayotgan obyektlar molekularining tuzilishi, elektron tuzilishi va spektroskopik parametrlarining kvant-kimyoviy hisob-kitoblari amalga oshirildi.

GAUSSIAN va ORCA kvant-kimyoviy dasturlar paketlari gaz fazasida ham, kondensatsiyalangan holatda ham molekulyar tizimlarning tuzilishi va xususiyatlarini hisoblash uchun mo'ljallangan [15]. GAUSSIAN dasturi bir qator havolalardan iborat bo'lib, ularning har biri alohida kompyuter dasturidir. Taqdim etilgan imkoniyatlar nuqtai nazaridan, GAUSSIAN to'plami eng kuchlilaridan biri bo'lib, kimyo, kondensatsiyalangan moddalar fizikasi va kvant mexanikasi bilan bog'liq keng ko'lami muammolarni hal qilishga imkon beradi.

Gaussian dasturi ketma-ket yoki parallel rejimda bajarilishi mumkin. Dastlabki ma'lumotlarni kiritish uchun topshiriq fayli kompilyatsiya qilinadi. Topshiriq fayli asosan topshiriq spetsifikatsiyasi va molekula spetsifikatsiyasidan iborat. Topshiriq fayli bo'limlardan iborat:

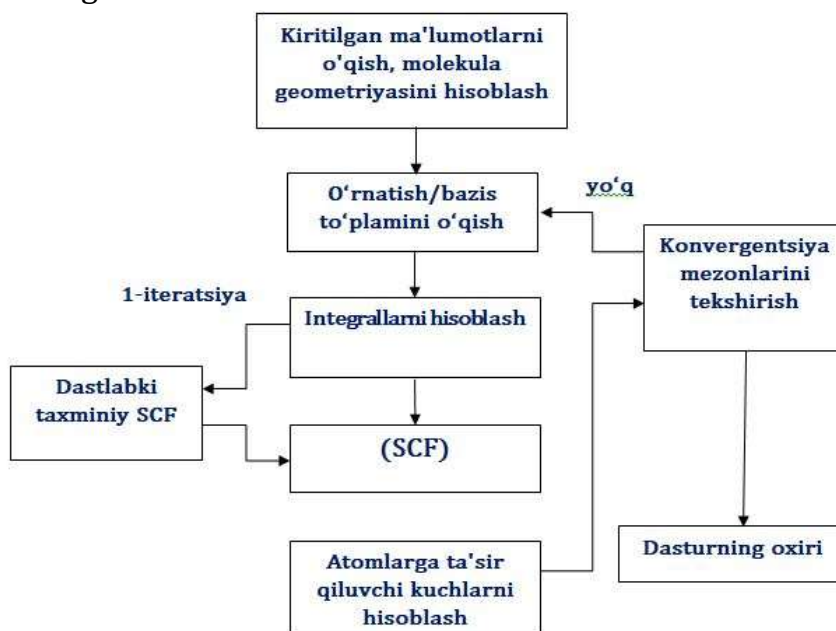
- Preprotessor ko'rsatmalari - Bu bo'limdagi buyruqlar dinamik xotirani sozlash va parallel bajarishda foydalaniladigan protsessorlar sonini belgilashni o'z ichiga oladi.
- Topshiriqlar spetsifikatsiyasi - Topshiriq spetsifikatsiyasi hisoblash usuli va atom bazis to'plamini, yechilishi kerak bo'lgan muammoning turini, turli xil dastur protseduralari uchun parametrlarni o'rnatishni (SCF va optimallashtirish protseduralarining yaqinlashuvi mezonlari, aniq algoritmlarni tanlash va boshqalarni) o'z ichiga oladi. Siz o'rnatilgan to'plamlardan birini tanlashingiz yoki o'zingiznikini yoki ikkalasining kombinatsiyasini o'rnatishingiz mumkin.
- Topshiriq nomi - vazifani aniqlash uchun ma'lumotlarni o'z ichiga oladi

- Molekula spetsifikatsiyasi - molekulaning spetsifikatsiyasi molekula zaryadini va uning multipletini va molekulaning boshlang'ich geometriyasini o'z ichiga oladi.
- Qo'shimcha bo'limlar - Har xil qo'shimcha vazifalar kiritilishi mumkin.



3-rasm. Brombenzol molekulasini atomlarining bog'lanishlari orasidagi masofalar va burchaklar

GAUSSIAN dasturida kvant-kimyoviy hisoblashlar odatda 4-rasmda ko'rsatilgan algoritm bo'yicha amalga oshiriladi.



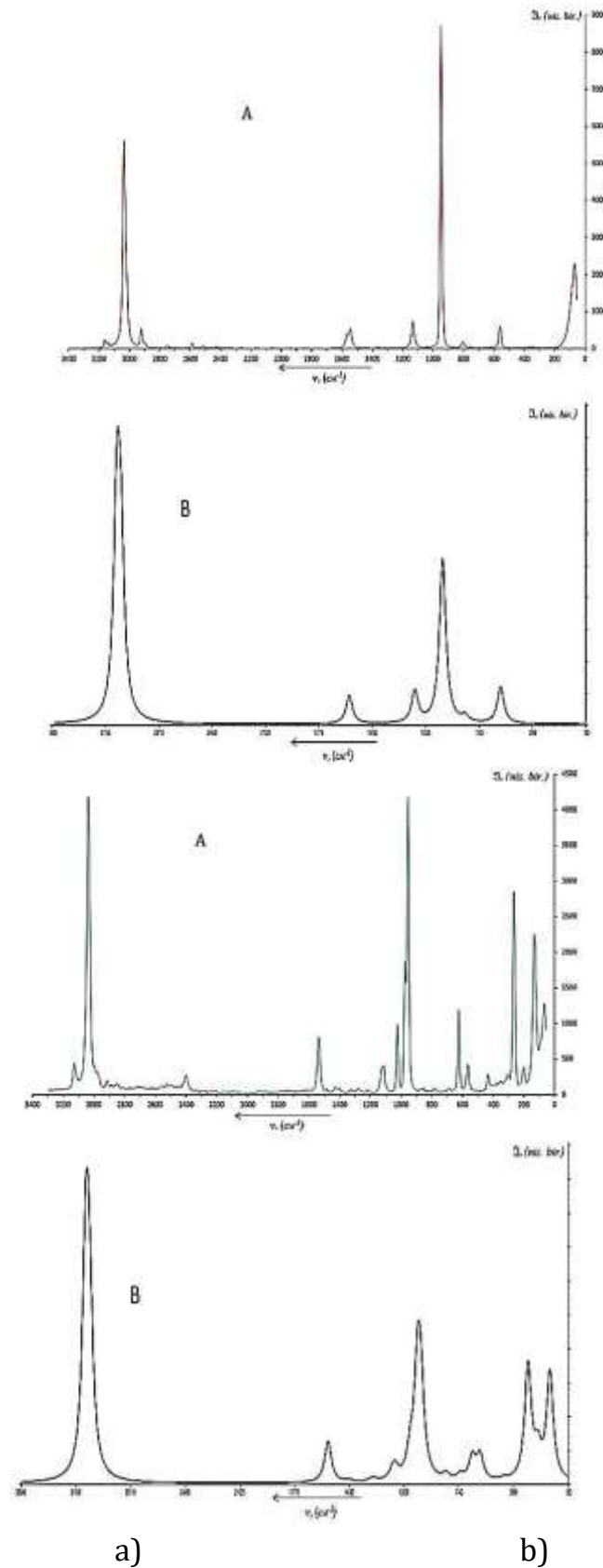
4-rasm. GAUSSIAN dasturida kvant-kimyoviy hisoblashlarni yechish algoritmi.

Ushbu dastur Xartri-Fok (HF) usuliga asoslangan bo'lib, molekulalararo o'zaro ta'sir parametrlarini aniqlash mumkin. Biz hisoblashlarda HF/6-31G** dan foydalandik, u Xartri-Fok taxminiga asoslangan va HF/STO-3G kabi boshqa modellarga qaraganda ancha yaxshi ishlaydi [19-22].

5-rasmda STR250 lazerli Raman spektrometrida konfokal mikroskop bilan olingan va HF/6-31G** yarim empirik ORCA dasturiy paketiga asoslangan ab initio kvant-kimyoviy usullar bilan hisoblangan spektrlarda olingan Raman spektral konturlari intensivligining o'rganilayotgan suyuqliklar chastotasiga spektral bog'liqligi



ko'rsatilgan. Raman sochilish intensivligi va qo'zg'atuvchi yorug'lik chastotasiga bog'liqligi klassik, yarim klassik yoki kvant nazariyalar yordamida ko'proq yoki kamroq cheklovlar bilan hisoblanishi mumkin.





5-rasm. a) Benzol b) brombenzol molekularida Yorug'likning kombinatsion sochilish spektral intensivligining chastotaga nisbatan bog'liqligi A - tajriba, B - kvant-kimyoviy hisoblash.

Brombenzol uchun to'rtta intensiv chiziqni taxminan 177sm^{-1} , 310sm^{-1} , 998sm^{-1} va 3077sm^{-1} chastotalari bilan ajratish mumkin. Eng intensiv chiziq 3077sm^{-1} da bo'lib, uning fonida nisbatan past intensivlikdagi 3142sm^{-1} chiziq yotadi. Bu shuni ko'rsatadiki, bu chiziqlarning barchasi bir xil tebranish $C = H$ ga tegishli bo'lishiga qaramay, ularning depolarizatsiya koeffitsientlari har xil. 1-jadvalda tajriba va kvant kimyoviy hisoblash metodidan foydalanib olingan natijalar keltirilgan.

1-jadval

Benzol C_6H_6				
Tajriba		Kvant-kimyoviy hisoblash		
ν , (sm^{-1})	\mathfrak{I} , (nisbiy birlik)	ν , (sm^{-1})	\mathfrak{I} , (nisbiy birlik)	ρ , (%)
608	302	601,94	570	0,7499
		602,18	738	0,7498
851	76	830,10	98	0,7499
		833,00	121	0,7498
993	5461	978	5872	0,0893
1179	311	1156,4	595	0,7499
		1156,8	535	0,7498
1589	207	1581,3	515	0,7499
		1581,5	482	0,7498
1607	154	-	-	-
2629	85	-	-	-
2960	290	-	-	-
3073	2409	3054,0	2764	0,7411
		3055,1	2624	0,7499
		3079,6	7728	0,1283
3178	82	-	-	-
3197	109	-	-	-

Brombenzol - C_6H_5Br				
Tajriba		Kvant-kimyoviy hisoblash		
ν , (sm^{-1})	\mathfrak{I} , (nisbiy birlik)	ν , (sm^{-1})	\mathfrak{I} , (nisbiy birlik)	ρ , (%)
177	980	163,93	3024	0,7499
244	231	241,14	738	0,7499
310	1745	301,98	3223	0,3378
481	187	457,19	69	0,7492
613	389	605,76	727	0,7499
668	696	657,14	659	0,1994



998	2530	978,17	2276	0,1255
1018	1592	1002,10	2858	0,0874
1068	826	1045,45	624	0,1007
1156	175	1143,08	321	0,7499
1165	344	1159,60	185	0,4487
1580	261	1563,87	812	0,6875
3077	1710	3059,87	2304	0,3472
3142	196	-	-	-

Umumiy tuzilish xususiyatlariga ega bo'lgan birikmalarning spektrlarini taqqoslashda ma'lum bo'ldiki, bir qator hollarda chastotalar bilan bir qatorda boshqa chiziq parametrlari - intensivlik, kenglik va depolarizatsiya darajasi - bir molekuladan ikkinchisiga o'tishda o'z qiymatini saqlab qoladi. Umumiy fizik mulohazalardan potentsial to'siqlarning balandligini topishga harakat qiladigan ishlarga qo'shimcha ravishda, potentsial to'siqlarni hisoblash uchun oddiy yarim empirik usullar taklif qilingan ishlar mavjud.

Yarim empirik hisoblash usullari potentsial to'siqning balandligi eng kichik va eng katta itarilishga ega bo'lgan pozitsiyalarda molekulalarning ikkala aylanadigan qismi orasidagi itarilish energiyalari farqiga teng degan taxminga asoslanadi. To'siqlarni yarim empirik hisoblashning bir qancha usullari mavjud [23,24]. [23] mualliflari potentsial o'zaro ta'sir uchun quyidagi umumiy formulani taklif qildilar:

$$U = \sum_{i,j} \left(\frac{k_{ji}}{r_{ij}^p} + \frac{h_{ij}}{r_{ij}^s} \right) \quad (6)$$

Ushbu ifodada birinchi atama itaruvchi kuchlarni, ikkinchi atama esa boshqa o'zaro ta'sirlarni tavsiflaydi. Bu yerda r_{ij} - har ikkala aylanuvchi guruhning vodород atomlari orasidagi angistruumlardagi masofalar (i - birinchi guruh atomlari indeksi, j - ikkinchi guruh atomlari indeksi. Atomlararo masofaning o'zgarishi bilan potentsial qiymatlarining keskin o'zgarishi tufayli juda muhimdir. Ushbu holatni ta'kidlash kerak, chunki to'siqning hisoblangan qiymati ikkita katta son o'rtasidagi farqdir: guruhlar orasidagi eng kichik va eng katta itarilish bo'lgan pozitsiyalarda itarilish energiyalari.

XULOSA

Molekulyar spektroskopiyaning, shu jumladan, spektral chiziqlarning kelib chiqishini aniqlash va ularni o'rganilayotgan birikmalarning xarakteristikalarini bilan bog'lash mumkin bo'lsa, Raman spektroskopiyasining imkoniyatlaridan yetarli darajada to'liq foydalanishga erishish mumkin. Chiziqlarning kelib chiqishi va molekulalarning tuzilishi haqida foydali ma'lumotlarni faqat empirik korrelyatsiyalar asosida olish mumkin. Xartri-Fok chegarasiga yaqin bo'lgan natijalarni beradigan juda katta bazalarda hisoblangan atomlararo masofalar eksperimental qiymatlardan sezilarli darajada kichikroq bo'lib chiqadi. Elektron korrelyatsiyani hisobga olish valentli bog'lanish uzunligining oshishiga va hisoblash xatolarining kamayishiga olib keladi. Ushbu ma'lumotlardan nega valentlikka bo'lingan bazis to'plamlarda ab initio



hisob-kitoblari eksperiment bilan yaxshi mos kelishi aniq bo'ladi. Bu foydalanilgan bazisning to'liq emasligi va elektron korrelyatsiyani e'tiborsiz qoldirish bilan bog'liq bo'lgan xatolarning o'zaro kompensatsiyasi bilan bog'liq.

REFERENCES:

1. B.J. Ka, E. Geva. Vibrational energy relaxation of polyatomic molecules in liquid solution via the linearized semiclassical method. *J. Phys. Chem. A* 110, 9555 (2006).
2. S.A. Kirillov, A. Morresi, M. Paolantoni. Recovery of the depolarization ratio of single lines from overlapping isotropic and anisotropic Raman profiles and assignment of molecular vibrations, with special reference to toluene and toluene-d8. *J. Raman Spectrosc.* 38, 383 (2007).
3. D. Wang, K. Mittauer, N. Reynolds. Raman scattering of carbon disulfide: The temperature effect. *Am. J. Phys.* 77, 1130 (2009).
4. J. Lindner, P. Vohringer, M.S. Pshenichnikov, D.A. Wiersma, M. Mostovoy. Vibrational relaxation of pure liquid water. *Chem. Phys. Lett.* 421, 329 (2006).
5. H.J. Bakker, A.J. Lock, D. Madsen. Strong feedback effect in the vibrational relaxation of liquid water. *Chem. Phys. Lett.* 384, 236 (2004).
6. Sherzodjon To'liqin O'G'Li Ahmedov, Bahodir Xudoyberganovich Eshchanov, and Jalol Baxtiyor O'G'Li Shodmonov. "AROMATIK UGLEVODORODLARDA MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLASHUVNING RAMAN SPEKTRLARIDA NAMOYON BO'LISHI" *Academic research in educational sciences*, vol. 3, no. 3, 2022, pp. 693-705.
7. Shodmanov J. B. O. G. L. et al. AROMATIK UGLEVODORODLARDA YORUG'LIKNING NOQUTBLANGAN MOLEKULYAR SOCHILISHI // *Academic research in educational sciences*. – 2022. – T. 3. – №. 3. – C. 1127-1137.
8. A.J. Lock, H.J. Bakker. Temperature dependence of vibrational relaxation in liquid H₂O. *J. Chem. Phys.* 117, 1708 (2002).
9. V. Pogorelov, L. Bulavin, I. Doroshenko, O. Fesjun, O. Veretennikov. The structure of liquid alcohols and the temperature dependence of vibrational bandwidth. *J. Mol. Struct.* 708, 61 (2004).
10. Bjarnason J.6., Hudson B.S., Andersen H.C. Quantum theory of line shapes in coherent Raman spectroscopy of gases and liquids // *J. Chem. Phys.* 1979. V.70. N. 9. P. 4130-4148.
11. Eshchanov B. The role of molecular structure in temperature effects of light scattering in liquids II *Journal of Scientific and Engineering Research*. 2017. Vol.4. N.12. P.445-449
12. Eshchanov B., Otajonov Sh., Isamatov A. Study of molecular dynamics of condensed states of a substance by spectroscopy // *Ukraine Journal of Physics*. 2014. V.59. N.3. P.254-256.
13. Sherzodjon To'liqin O'G'Li Ahmedov, Bahodir Xudoyberganovich Eshchanov, and Jalol Baxtiyor O'G'Li Shodmonov. "AROMATIK UGLEVODORODLARDA



MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLASHUVNING RAMAN SPEKTRLARIDA NAMOYON BO'LISHI" Academic research in educational sciences, vol. 3, no. 3, 2022, pp. 693-705.

14. Shodmanov, J. B., Eshchanov, B. X., Ahmedov, Sh. T. (2022). Aromatik uglevodorodlarda yorug'likning noqutblangan molekulyar sochilishi. Academic research in educational sciences, 3(3), 1127-1137.

15. Sherzodjon Ahmedov, Gulnoza Djumayeva. (2022). SURFACE ENHANCED RAMAN SCATTERING: MECHANISM AND PRACTICAL APPLICATIONS. Galaxy International Interdisciplinary Research Journal, 10(12), 983-991. Retrieved from <https://www.giirj.com/index.php/giirj/article/view/4454>

16. B. Eshchanov, Sh. Ahmedov. (2022). METHODOLOGY FOR PROCESSING RAMAN SPECTRAL RESULTS: QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION. Web of Scientist: International Scientific Research Journal, 3(12), 459-470. <https://doi.org/10.17605/OSF.IO/8JEY9>

17. Ahmedov Sherzodjon To'lqin o'g'li. "Nanostrukturali Metall Sirtlarda Raman Signaling Kuchayishi". Diversity Research: Journal of Analysis and Trends, vol. 1, no. 2, May 2023, pp. 64-72, <https://academiaone.org/index.php/2/article/view/72>.

18. L. Bulavin, I. Doroshenko, O. Lizengevych., V. Pogorelov, L. Savransky, O. Veretennikov. Raman study of molecular associations in methanol. In: Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering 5507, 138 (2004).

19. F.H. Tukhvatullin, V.E. Pogorelov, A. Jumabaev, H. Hushvaktov, A. Absanov, A. Shaymanov. Aggregation of molecules in liquid methyl alcohol and its solutions. Raman spectra and ab initio calculations. J. Mol. Struct. 881, 52 (2008).

20. Bjarnason J.6., Hudson B.S., Andersen H.C. *Quantum theory of line shapes in coherent Raman spectroscopy of gases and liquids* //J. Chem. Phys. 1979. V.70. N. 9. P. 4130-4148.

21. Bianco R., Timoneda J.J., Hynes J.T. *Equilibrium and Nonequilibrium Solvation and Solute Electronic Structure. Quantum Theory in a Multidiabatic State Formulation* // J. Phys. Chem. 1994. V. 98. N. 47. P. 12103-12107.

22. Neese F. *The ORCA program system.*//Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. 2012/ V.2. N.I. P. 73-78.

23. Desbat B., Huong P. *Structure of liquid hydrogen fluoride studied by infrared and Raman spectroscopy* II J. Chem. Phys.1983. V.78. N.I 1. p.6377-6381

24. F.H. Tukhvatullin, V.E. Pogorelov, A. Jumabaev, H. Hushvaktov, A. Absanov, A. Usarov. Polarized components of Raman spectra of O-H vibrations in liquid water. J. Mol. Liquids. 160, 88 (2011).

25. F.H. Tukhvatullin, A. Jumabaev, G. Muradov, H. Hushvaktov, A. Absanov. Raman spectra of C-H vibrations of acetonitrile in aqueous and other solutions. Experimental results and ab initio calculations. J. Raman Spectrosc. 36, 932 (2005).

26. Jr. C.W. Bauschlicher, A. Ricca. On the calculation of the vibrational frequencies of C6H4. Chem. Phys. Lett. 566, 1 (2013).



27. B. Eshchanov, Sh. Otajonov A. Isamatov. On possible models of thermal motion of molecules and temperature effect on relaxation of optical anisotropy in bromine benzene. Ukr. J. Phys. 56, 1178 (2011).

28. Magnasco V. *An empirical method for calculating barriers to internal rotation in simple molecules* III 1 Nuovo Cimento 1962, V.24(3). P.425^41.

29. Татевский В. М. *Квантовая механика и теория строения молекул*. М.: Изд. МГУ, 1965. 164 стр.

30. B. Eshchanov, Sh. Otajonov, A. Isamatov, D. Babajanov. Dynamics of relaxation processes in liquids: Analysis of oscillation and orientation spectra. J. Mol. Liq. 202, 148 (2015).

31. Y. Takasu, S. Matsumoto, Y. Fujii, I. Nishio. Raman study of the low temperature behavior of tetrahydrofuran molecule in the cage of clathrate hydrate. Chem. Phys. Lett. 627, 39 (2015).

32. Sh. Otajonov, B. Eshchanov, A. Isamatov. Manifestation of substance molecular structure in temperature effects of light scattering. J. Chem. Chem. Engin. 7, 791 (2013).