

CƏLİL ƏLƏKBƏR OĞLU CƏFƏROV

**İZOPROPANOL MOLEKULUNUN FIRLANMA
SPEKTRLƏRİNDƏ YÜKSƏK TƏRTİB
MƏRKƏZƏQAÇMA TƏHRİFLƏRİ VƏ QADAĞAN
OLUNMUŞ KEÇİDLƏR**

2203.01 –elektronika

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi
dərəcəsi almaq üçün təqdim olunmuş dissertasiyasının

A V T O R E F E R A T I

BAKİ 2015

İş Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının akademik H.M.Abdullayev adına Fizika İnstitutunda yerinə yetirilmişdir.

Elmi rəhbərlər:

Akademik, fizika-riyaziyyat elmləri doktoru

Ç.O. Qacar

Fizika-riyaziyyat elmləri namizədi

S.B. Kazımova

Rəsmi opponətlər:

Fizika üzrə elmlər doktoru

İ.S.Həsənov

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor

E.Ə.Məsəmov

Aparıcı təşkilat: Azərbaycan Texniki Universiteti, "Fizika" kafedrası

Dissertasiyanın müdafiəsi «_11_»_11_____ 2015-ci il tarixində saat _____da Azərbaycan MEA akademik H.M. Abdullayev adına Fizika İnstitutunun nəzdində fəaliyyət göstərən D01.011 Dissertasiya Şurasının iclasında keçiriləcəkdir.

Ünvan: Bakı ş., Az-1143, H.Cavid prospekti, 131

e-mail: director@physics.ab.az

Dissertasiya işi ilə Azərbaycan MEA Fizika İnstitutunun kitabxanasında tanış olmaq olar

Avtoreferat «_»_____ 2015-ci ildə göndərilmişdir

Dissertasiya Şurasının elmi katibi,
fizika-riyaziyyat elmləri doktoru , professor

D.H. Arash

İŞİN ÜMUMİ XARAKTERİSTİKASI

Mövzunun aktuallığı. Molekulların fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərindən onların quruluşları, dipol və kvadrupol momentləri, alçaqtezlikli rəqsləri, rəqs-fırlanma qarşılıqlı təsirləri və s. haqda mikrodalğa spektroskopiyası ilə əldə olunan məlumatlar molekulların ümumi quruluş nəzəriyyəsinin inkişaf etdirilməsi nöqteyi-nəzərindən xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Molekulyar fizikanın, astrofizikanın, kvant elektronikasının və kimyanın bir sıra istiqamətlərinin inkişafı ilə əlaqədar olaraq bu məlumatların istifadə dairəsi mütəmadi olaraq artır. Molekulların fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin öyrənilməsi astrofiziklərə ulduzlararası fəzada bir sıra nisbətən sadə molekulları, o cümlədən müxtəlif izotoptərkibli spirtləri onların müşahidə olunan fırlanma keçidlərinə əsasən aşkar etməyə imkan verdi.

Mikrodalğalı spektroskopiya metodları molekulların məlum fırlanma spektrlərinə əsasən maddələrin keyfiyyətə və kəmiyyətə təhlil edilməsinə, sürətli gedən reaksiyaların, sərbəst radikalların və az yaşayan molekulların qeyd edilməsinə, atmosferin çirklənməsinin aşkar edilməsinə imkan yaradır. İkiqat RD-MD kvant rezonanslı radiospektrometrlərin işlənilib hazırlanması sayəsində molekulların fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin öyrənilməsi sahəsində xeyli irəliləyiş əldə olunub.

İzopropil spirti molekulu uyğun olaraq $C - C$ və $C - O$ birqat rabitələri ətrafında daxili fırlanmaya məruz qalan iki metil və bir hidrosil qruplarından ibarət olan mürəkkəb quruluşa malikdir. Bu cür daxili fırlanma sərbəstlik dərəcəsinin mövcudluğu konformasiya geterogenliyinə və nəticə etibarı ilə fırlanma spektrinin mürəkkəbləşməsinə səbəb olur. Bu sinifdən olan molekulların dolğun və mürəkkəb spektrlərinin tədqiqinə demək olar ki, yaxın vaxtlarda başlanmışdır və onların interpretasiyasının nəzəri və təcrübi məsələlərində bir çox aydınlaşdırılmamış qeyri- müəyyənliklər bu günədək mövcudluğunu saxlayır.

Odur ki, izopropil spirti molekulunun santimetrik, millimetrik və submillimetrik fırlanma spektrlərinin tədqiqi, istər izopropil spirti molekulunun struktur, konformasiya, elektrik xarakteristikalarının təyininə, istərsə də asimmetrik fırfıra tipli molekulların müxtəlif təsirlər (həyəcanlaşmalar) səbəbindən mürəkkəbləşən fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin öyrənilməsi və identifikasiyası ilə bağlı bir sıra ümumi nəzəri məsələlərin aydınlaşdırılmasında və metodiki üsulların işlənilib hazırlanmasında çox mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

Tədqiq olunan molekulların enerji spektrlərində bir sıra üçsəviyyəli və dördsəviyyəli sistemlərin mövcudluğu fırlanma spektrlərinin identifikasiyasında və radiospektrometrlərin həssaslığının və ayırdetmə qabiliyyətlərinin yüksəldilməsində ikiqat RD-MD kvant rezonansları metodlarından istifadə edilməsinə, həmçinin bu cür üçsəviyyəli və dördsəviyyəli sistemlərdən istifadə edilməsinin metodik məsələlərini həll etməyə imkan verir.

İstehsalı dünyada bu günədək də çox məhdudlaşdırılmış, müasir mikrodalğalı spektroskopiyanın şərtlərinə cavab verən, iş prinsipi sadələşdirilmiş yarımavtomat hibrid radiospektrometrlərin işlənilib hazırlanmasını təmin etmədən mikrodalğalı spektroskopiyanın inkişafı mümkünsüzdür. Fizika İnstitutunun “Molekulyar spektroskopiya” laboratoriyasında yaradılmış tezlik sintezatorlu, proqramla idarəedilən, qoyulan yüksək tələblərə cavab verən hibrid radiospektrometr mikrodalğalı spektroskopiyanın bütün müasir tələblərinə cavab verir.

İşin məqsədi yüksək kvant ədədlərinə uyğun, daxili fırlanma nəticəsində daha da mürəkkəbləşən fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərini ifadə edən fırlanma hamiltonianının parametrlərinin seçilməsi, izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin molekulyar parametrlərinin dəqiqləşdirilməsi, bu molekulun trans- konformerinin fırlanma spektrində qadağan olunmuş keçidlərin və ikiqat RD-MD kvant rezonanslarının axtarışları, molekulların daxili fırlanma hesabına daha da mürəkkəbləşən fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin identifikasiyasının bəzi nəzəri və metodiki problemlərinin həll edilməsidir.

Qarşıya qoyulan məqsədlərə çatmaq üçün aşağıdakı məsələlərin həll edilməsi zəruri idi:

1. İzopropil spirti molekulunun tədqiq olunan diapazonda fırlanma spektrinin fırlanma kvant ədədi J –nin qiymətlərinin artması istiqamətində identifikasiyasını davam etdirmək, molekulun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərini dəqiqləşdirmək.
2. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının fırlanma sabitlərini və kvartik mərkəzəqaçma sabitlərini, həmçinin tunnel parçalanma parametrlərini dəqiqləşdirmək məqsədi ilə onun fırlanma spektrinin identifikasiyasını davam etdirmək.

3. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının sekstik mərkəzəqaçma sabitlərini təyin etmək.
4. İzopropanol molekulunun struktur parametrlərini dəqiqləşdirmək.
5. İzopropanol molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektrində qadağan olunmuş keçidlərin axtarışlarını aparmaq.
6. Molekulların fırlanma spektrlərinin identifikasiyasının bir sıra nəzəri və metodiki problemlərinin həlli üçün kompüter proqramları tərtib etmək.

İşin elmi yenilikləri:

1. İlk dəfə olaraq izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin daxili fırlanma nəticəsində daha da mürəkkəbləşən fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərini yüksək dəqiqliklə ifadə edən fırlanma hamiltonianı tam formatda təklif edilmişdir.
2. İlk dəfə olaraq, tədqiq olunan molekulun trans- və qoş-konformerlərinin fırlanma spektrlərində qadağan olunmuş keçidlərin mövcudluğu məsələsinə nəzəri və təcrübi olaraq baxılmışdır.
3. İzopropil spirti molekulunun trans- konformerinin fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri xeyli dəqiqləşdirilmişdir.
4. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının kvadratik, kvartik mərkəzəqaçma sabitləri və tunnel parçalanma parametrləri dəqiqləşdirilmişdir.
5. İlk dəfə olaraq izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının sekstik mərkəzəqaçma sabitləri təyin edilmişdir.
6. İzopropanol molekulunun struktur parametrləri dəqiqləşdirilmişdir.

İşin praktiki əhəmiyyəti. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin ilk dəfə olaraq müşahidə edilmiş və identifikasiya edilmiş 314 fırlanma keçidinin daxil olduğu mikrodalğa spektral xəttlərinin kataloqu tərtib olunmuşdur. Kataloqdan çox az miqdarda olan maddələrin keyfiyyətə təhlil edilməsində istifadə oluna bilər. Kataloqa daxil olan tezliklər atmosferin lokal və məsafədən zondlanmasında və izopropil spirti molekulunun ulduzlararası fəzada axtarışlarında da istifadə oluna bilər. İzopropil spirti molekulunun trans- və qoş-konformerlərinin spektroskopik parametrləri molekulun

strukturunun təyində, molekul daxili potensial funksiyaların təyin olunmasında, hər hansı səbəb üzündən təcrübi olaraq hələ müşahidə oluna bilməyən spektral xəttlərin tezliklərinin əvvəlcədən təyin edilməsində istifadə oluna bilərlər.

Müdafiyyə çıxarılan əsas elmi müddəalar:

1. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin daxili fırlanma nəticəsində daha da mürəkkəbləşən fırlanma spektrini yüksək dəqiqliklə ifadə edən reduksiya edilmiş daxili fırlanma hamiltonianı.
2. $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonunda müxtəlif texnoloji proseslərin monitorinqində və bu molekulun ulduzlararası fəzada axtarışlarında maraq kəsb edən spektral xəttlərinin kataloqu.
3. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin identifikasiya edilmiş millimetrik dalğa uzunluğu diapazonuna düşən 314, teraherslik dalğa uzunluğu diapazonuna düşən 130 və 143 qadağan olunmuş keçidi və molekulun trans-konformerinin 126 qadağan olunmuş keçidi.
4. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının dəqiqləşdirilmiş kvadratik, kvartik mərkəzəqaçma sabitləri və tunnel parçalanma parametrləri.
5. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının ilk dəfə olaraq təyin edilmiş sektik mərkəzəqaçma sabitləri.
6. İzopropil spirti molekulunun dəqiqləşdirilmiş struktur parametrləri.
7. Molekulların fırlanma spektrlərinin identifikasiyasının bir sıra nəzəri və metodiki problemlərinin həlli üçün tərtib edilmiş kompyuter proqramları.

Dissertasiya işinin aprobasiyası. İşin əsas nəticələri akademik A.M.Paşayevin anadan olmasının 75-illiyinə həsr edilmiş Beynəlxalq Konfransda(Bakı,2004), Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fizika İnstitutunun elmi seminarlarında və Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fotoelektronika İnstitutunun elmi seminarlarında məruzə olunmuşdur.

Nəşrlər. Dissertasiya işinin əsas nəticələri və məzmunu üzrə Respublika jurnallarında, Beynəlxalq jurnallarda və konfrans materiallarında 10 iş, o cümlədən 4 məqalə,4 konfrans materialı, 1 preprint, 1 kitab dərc olunmuşdur.

Dissertasiya işinin strukturu və həcmi: Dissertasiya işi girişdən, dörd fəsildən, əsas nəticələrin qısa şərhindən və istifadə olunmuş 161 adda elmi ədəbiyyatın bibliografik siyahısından ibarət olub, 121 çap vərəqində, o cümlədən 16 cədvəl, 8 şəkildə şərh olunmuşdur.

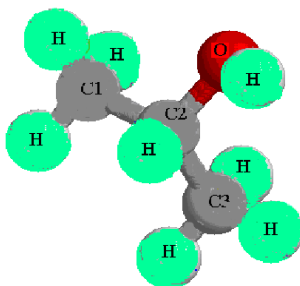
DISSERTASIYA İŞİNİN QISA MƏZMUNU

Dissertasiya işi Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Fotoelektronika İnstitutunun bir sıra biratomlu spirtlərin santimetrik və millimetrik dalğa uzunluqları diapazonuna düşən mikrodalğa spektrlərinin nəzəri və təcrübi şərh edilmə metodları ilə məşğul olan “Molekulyar spektroskopiya” laboratoriyasında aparılan elmi-tədqiqat işlərinin çərçivəsi daxilində aparılmışdır.

Girişdə dissertasiya işinin mövzusunun aktuallığı qeyd olunub, tədqiqat işinin məqsədi, işin aparılması ərəfəsində həll olunan əsas məsələlər, işin elmi yenilikləri və alınmış nəticələrin praktiki əhəmiyyəti, müdafiyyəyə təqdim olunan əsas elmi müddəalar şərh olunub və işin əsas məzmunu qısa olaraq ifadə olunub.

Birinci fəsildə izopropil spirti molekulunun daxili fırlanma, yüksək mərkəzəqaçma həyəcanlaşması və s. müxtəlif təsirlər səbəbindən mürəkkəbləşən fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin öyrənilməsi və identifikasiyasına həsr olunmuş işlərin qısa xülasəsi verilmişdir. İzopropil spirti molekulu iki metil və bir metin və bir hidroksil qruplarından ibarətdir. Belə ki, metil qrupu və OH qrupu təxminən eyni kütləyə malik olduğuna görə bu molekul sıxılmış simmetrik fırfıraya yaxın olan asimmetrik fırfıradır. “C” oxu onun simmetriya oxuna yaxındır və $\chi = -0.909$ (şəkil 1). Burada qeyd edilmişdir ki, izopropil spirti molekulunun qoş-konformerləri simmetriya müstəvisinə malik deyillər və onlar hidroksil qrupunun C- O rabitəsi ətrafında trans-konformerin simmetriya müstəvisindən hər iki tərəfə təxminən 120° fırlanmasıyla alınrlar (şəkil 2). Bu fəslin birinci paragrafında qeyd edilir ki, mikrodalğa şüalanması udulmasının elektrik molekulyar modulyasiya metodu ştark modulyasiyası kimi tanınır və o istifadə olunduğu bütün tədqiqatların gedişində molekullar tərəfindən mikrodalğa şüalanması udulması barədə məlumatların alınması və molekulların dipol momentlərinin Ştark effektinə əsasən təcrübi təyin olunmasında əsas rol oynayır. Göstərilmişdir ki, udulma spektrinin geniş diapazonlarda qeyd edilməsində və dar tezlik diapazonlarında spektral xəttlərin tezliklərinin dəqiq ölçülməsində və tezliyin tənzimlənməsinin aşağı sürətlərində udulma signalının düzbucaqlı dalğaötürücüdə Ştark

effektindən istifadə edilərək elektrik molekulyar modulyasiya edilməsi metodu çox əlverişlidir. O, radiospektrometrlərin həssaslığının artırılmasına imkan verir, molekulların elektrik xassələri haqda əlavə məlumatların alınmasına şərait yaradır və spektral xətlərin Ştark komponentlərinə görə spektrlərin identifikasiyasını həyata keçirməyə kömək edir.



Şəkil 1. İzopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ vizual təsviri

Bu fəslin ikinci paragrafı eksperimental tədqiqat metodlarına həsr olunub. Qeyd olunur ki, mikrodalğalı spektroskopiyada eksperimental araşdırmaların dəqiqliyi santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonlarında konkret şüalanmanın generasiyasının əlverişli metodlarının işlənilib hazırlanması, həm tətbiq edilən elektrik sahəsinin signal şüalanmalarının tədqiq edilən maddə ilə qarşılıqlı təsirinin və həm də udma şüalanmalarının detektə edilməsinin optimal şərtlərinin yaradılması ilə sıx bağlıdır.

Bu paragrafda Fotoelektronika İnstitutunun “Molekulyar spektroskopiya” laboratoriyasında yaradılmış və mikrodalğalı spektroskopiyanın bütün müasir və yüksək tələblərinə cavab verən molekulyar ştark modulyasiyalı və ikiqat RD-MD kvant rezonanslı, tezlik sintezatoru ilə təhciz olunmuş, proqramla idarə edilən hibrid radiospektrometrlərin tam təhlili verilmişdir. İstər ştark modulyasiyası, istər sə də ikiqat RD-MD kvant rezonans modulyasiyaları hesabına spektrlərin identifikasiyasını asanlaşdıran əlavə məlumat əldə etmək olar. Fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrləri mürəkkəb və doymuş olduqda ştark

komponentlərinə əsasən onların şərhı ya çox çətin olur, ya da qeyri-mümkün olur, çünki spektral xəttlər və onların ştark komponentləri bir-birinin üstünü örtür. Molekulların mürəkkəb və doymuş fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin şərhində ikiqat kvant rezonans modulyasiyalarından istiadə etmək çox əlverişlidir, çünki onlar molekulun sıx spektrindən yalnız ümumi enerji səviyyəsinə malik olan keçidləri ayırıb seçməyə imkan verir. Əgər identifikasiya səhv aparılıbsa, bu zaman ikiqat kvant rezonans modulyasiyasının siqnalı müşahidə olunmayacaq. Bu paraqrafda molekulyar ştark modulyasiyalı və ikiqat RD-MD kvant rezonans modulyasiyalı hibrid radiospektrometrin blok- sxemi verilmişdir.

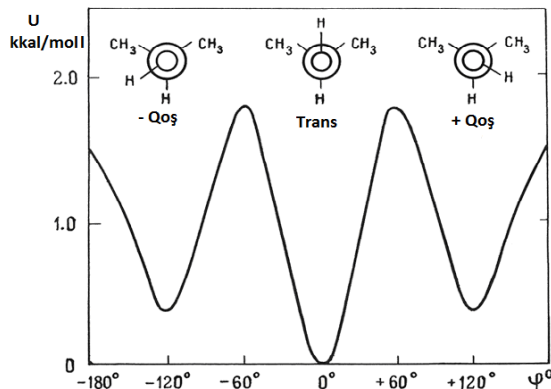
Bundan başqa qeyd edilmişdir ki, düzbucaqlı dalğaötürücü qutunun novşəkili dalğaötürücü ilə əvəz edilməsi lazım gəldikdə ştark modulyasiyası rejimində elektrik sahəsinin yüksək gərginlikli düzbucaqlı impulslarını verməyə-ötürməyə, lazım gəldikdə də ikiqat RD-MD kvant rezonanslarının modulyasiyası rejimində radiotezlik və mikrodalğa tezlikli məskunlaşdırma şüalanma siqnalının verilməsinə imkan verir.

Bu paraqrafda qeyd edilmişdir ki, hibrid radiospektrometrin həssaslığının və ayırdetmə qabiliyyətinin artırılması üçün siqnalın gücləndirilməsi modulyasiya tezliyində sinxron detektorun tətbiqi ilə həyata keçirilib.

Bu fəslin üçüncü paraqrafında izopropil spirti molekulunun trans- və qoş-konformerlərinin santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonlarında fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin araşdırmalarına həsr olunmuş işlərin qısa xülasəsi verilmişdir.

Dissertasiya işinin ikinci fəslı izopropil spirti molekulunun $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ qoş-konformerinin daxili fırlanma hesabına daha da mürəkkəbləşən millimetrik və submillimetrik fırlanma və rəqsi-fırlanma spektrlərinin tədqiqinə həsr olunub.

Bu fəslin birinci paraqrafı ilk dəfə olaraq bu işdə istifadə olunan kvartik və sekstik mərkəzəqaçma termlərinin daxil olduğu reduksiya edilmiş daxili fırlanma hamiltonianının təqdim edilməsinə həsr olunub. Burada mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının kvartik və sekstik termlərinin daxil olduğu reduksiya edilmiş daxili fırlanma hamiltonianının diaqonal və qeyri- diaqonal bloklarının ifadələri verilmişdir.



Şəkil 2. İzopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ hidroksil qrupunun C- O rabitəsi ətrafında daxili fırlanmasının potensial enerjisi

Bu paragrafda daxili fırlanmanın bütün parametrlərinin və sekstik mərkəzəqəçmə həyəcanlaşma sabitlərinin təyin olunması, həmçinin əvvəlki işlərdə təyin olunmuş daxili fırlanmanın parametrlərinin və kvartik mərkəzəqəçmə həyəcanlaşma sabitlərinin dəqiqləşdirilməsi üçün izopropil spirti molekulunun qoş konformerinin böyük J-yə malik, mümkün olduqca daha çox sayda spektral xəttinin identifikasiyasının həyata keçirilməsi zərurəti əsaslandırılmışdır.

Bu fəslin ikinci paragrafı izopropil spirti molekulunun qoş- konformerinin santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonlarına düşən fırlanma spektrinin identifikasiyasına və reduksiya edilmiş daxili fırlanma hamiltonianının parametrlərinin təyin edilməsinə həsr olunub. Burada identifikasiya edilmiş spektral xətlərin tezlikləri əsasında spektroskopik parametrlərin ümumiləşdirilmiş ən kiçik kvadratlar üsulu ilə təyin olunması metodlu təqdim olunub, spektroskopik parametrlərin xətlərinin və onlar arasında korrelyasiyaların hesablanması üçün istifadə olunan ifadələr təqdim edilib. Bu paragrafda izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün fırlanma hamiltonianının dəqiqləşdirilmiş kvadratik və kvartik mərkəzəqəçmə sabitləri, daxili fırlanma parametrləri və tunnel parçalanma parametrləri, həmçinin təqdim olunan işdə ilk dəfə olaraq təyin olunmuş sekstik mərkəzəqəçmə sabitləri də verilmişdir (cədvəl 1).

Bundan əlavə burada bütün təyin olunan parametrlərin qiymətlərinin xətaləri və onların korrelyasiya matrisi də cədvəl şəklində verilmişdir. Paraqrafın sonunda izopropil spirti molekulunun $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ qoş-konformerinin təqdim olunan işdə identifikasiya edilmiş spektral xəttlərinin tezlikləri (santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonlarına daxil olan) verilmişdir.

Dissertasiya işinin üçüncü fəsli izopropil spirti molekulunun trans-konformerinin santimetrik, millimetrik və submillimetrik dalğa uzunluqları diapazonlarında fırlanma və rəqsi- fırlanma spektrlərinin araşdırılmasına və bütün spektr boyu qadağan olunmuş keçidlərin axtarışına həsr olunmuşdur.

Bu fəslin birinci paraqrafında molekulların fırlanma və rəqsi- fırlanma spektrlərində qadağan olunmuş keçidlərin nəzəri araşdırmaları haqda məlumat verilmiş, bu cür keçidlərin mövcudluğunu təsdiq edən ilk təcrübi işlərdən bəhs edilmişdir. Bu paraqrafta etil spirti molekulunun trans-konformerinin 73 və normal propil spirti molekulunun 17 identifikasiya edilmiş qadağan olunmuş keçidləri təqdim edilmişdir.

Burada, həmçinin etil və normal propil spirti molekullarının trans-konformerlərinin fırlanma və mərkəzəqaçma həyəcanlaşması sabitləri, onların hesablanma xətaləri və bu parametrlərin korrelyasiya matrisləri də verilmişdir.

Bu fəslin ikinci paraqrafında izopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ trans-konformerinin mikrodalğa spektrində qadağan olunmuş keçidlərin axtarılması prosesindən bəhs edilir. Göstərilmişdir ki, izopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ trans-konformerinin dipol momentinin μ_b və μ_c komponentlərinin yerləşdiyi simmetriya müstəvisinə malikdir və Əliyev M.R.-nin qeyd etdiklərinə görə bu tip molekulların fırlanma spektrlərində mərkəzəqaçma həyəcanlaşması hesabına dipol momentinin simmetriya müstəvisinə perpendikulyar olan komponentinə (μ_a) uyğun olan keçidlər qadağan olunmuş keçidlər meydana çıxı bilər.

Bu paraqrafta izopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ trans-konformerinin müşahidə olunan fırlanma spektrində qadağan olunmuş keçidlərin mövcudluğunu təsdiq edən bir neşə dublet keçidlərin tezlikləri verilmişdir. $19_{12,7}$ - $19_{12,8}$ 50986.034 (^aQ – budaq) и $19_{12,7}$ - $19_{11,8}$ 50990.509 (^bQ – budaq) dublet keçidlərinin lent yazısı təqdim edilmişdir. Bu paraqrafta tədqiq olunan mikrodalğa diapazonunda 126 identifikasiya edilmiş qadağan olunmuş (μ_a) keçidin təcrübi ölçülmüş tezlikləri, bu tezliklərin II' koordinat təsvirində hesablanmış qiymətləri, tezliklərin ölçülmüş və hesablanmış qiymətləri arasındakı fərqlər verilmişdir.

Cədvəl 1

İzopropil spirti $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun qoş –konformerinin fırlanma sabitləri, daxili fırlanma parametrləri, mərkəzəqaçma həyəcanlaşması əmsalları

Parametrlər	iş [2]	Bu iş
1	2	3
$A_S(\text{MΓu})$	8638.34426(307)	8638.34115(77)
$B_S(\text{MΓu})$	8065.08358(260)	8065.11027(118)
$C_S(\text{MΓu})$	4768.28623(231)	4768.27684(95)
$A_A(\text{MΓu})$	8640.72246(291)	8640.73843(61)
$B_A(\text{MΓu})$	8061.37443(266)	8061.38308(119)
$C_A(\text{MΓu})$	4768.21958(226)	4768.21670(94)
$\Delta(\text{MΓu})$	46798.9747(283)	46798.94898(2040)
$R_{CA}(\text{MΓu})$	57.238629(784)	114.55590(55)
$R_{AB}(\text{MΓu})$	32.62160 (243)	65.20951(137)
$P_C(\text{MΓu})$	0.004695(427)	-0.00737(17)
$P_B(\text{MΓu})$	-0.0132559(492)	-0.01625(2)
$P_{CA}(\text{MΓu})$	--	0.01310(38)
$P_{AB}(\text{MΓu})$	0.015074(229)	0.01833(2)
$D_{J,S}(\kappa\Gamma u)$	0.00434317(927)	0.00830543(202)
$D_{JK,S}(\kappa\Gamma u)$	-0.0026650(427)	-0.01501353(749)
$D_{K,S}(\kappa\Gamma u)$	0.0068919(418)	0.00775344(652)
$d_{J,S}(\kappa\Gamma u)$	0.00163128(448)	-0.00031739(79)
$d_{K,S}(\kappa\Gamma u)$	0.0019568(150)	0.01480324(2583)
$D_{J,A}(\kappa\Gamma u)$	0.00381218(742)	0.00770272(239)
$D_{JK,A}(\kappa\Gamma u)$	-0.0015386(297)	-0.01340670(804)
$D_{K,A}(\kappa\Gamma u)$	0.0061093(294)	0.00677612(668)
$d_{J,A}(\kappa\Gamma u)$	0.00137027(363)	-0.00059374(93)
$d_{K,A}(\kappa\Gamma u)$	0.0025513(124)	0.00976137(2974)
$\Phi_{J,S}(\Gamma u)$		0.00000011(0)
$\Phi_{JK,S}(\Gamma u)$		-0.00000106(2)
$\Phi_{KJ,S}(\Gamma u)$		0.00000072(6)
$\Phi_{K,S}(\Gamma u)$		0.00000017(4)
$\varphi_{J,S}(\Gamma u)$		0.00000009 (0)
$\varphi_{JK,S}(\Gamma u)$		0.00000342 (1)
$\varphi_{K,S}(\Gamma u)$		0.00000262(13)
$\Phi_{J,A}(\Gamma u)$		0.00000025 (0)
$\Phi_{JK,A}(\Gamma u)$		-0.00000009 (2)
$\Phi_{KJ,A}(\Gamma u)$		-0.00000143 (6)
$\Phi_{K,A}(\Gamma u)$		0.00000122 (4)
$\varphi_{J,A}(\Gamma u)$		-0.00000019 (0)
$\varphi_{JK,A}(\Gamma u)$		0.00000296 (2)
$\varphi_{K,A}(\Gamma u)$		0.00000329 (13)

Cədvəl 2

İzopropil $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ - spirti molekulunun trans –konformerinin fırlanma sabitləri, mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsallarının qiymətləri, bu parametrlərin hesablanma xətalrı və korrelyasiya matrisi

Parametrlər	Qiymətlər	korrelyasiya matrisi												
X(MHs)	4765.2340(9)	1.0												
Y (MHs)	8489.0180(9)	0.7	1.0											
Z (MHs)	8041.9192(9)	0.7	0.8	1.0										
Δ_J (kHs)	4.619(1)	0.7	0.8	0.7	1.0									
Δ_{JK} (kHs)	- 2.905(3)	0.2	0.1	0.3	0.1	1.0								
Δ_K (kHs)	5.603(2)	-0.2	-0.1	-0.1	0.0	-0.8	1.0							
δ_J (kHs)	-1.749(0)	0.0	-0.5	-0.2	-0.3	-0.1	0.1	1.0						
δ_K (kHs)	-1.550(1)	0.2	-0.1	0.0	-0.1	0.5	-0.5	0.1	1.0					
H_J (Hs)	0.0008(10)	0.6	0.7	0.5	0.9	-0.3	0.2	-0.2	-0.2	1.0				
H_{JK} (Hs)	0.0261(40)	0.2	0.3	0.3	0.1	0.8	-0.8	-0.4	0.3	-0.1	1.0			
H_{KJ} (Hs)	0.0001(71)	-0.2	-0.3	-0.1	-0.2	-0.4	0.6	0.5	-0.1	-0.1	-0.8	1.0		
H_K (Hs)	0.0346(37)	0.1	0.3	0.1	0.2	0.1	-0.2	-0.5	0.0	0.1	0.6	-0.9	1.0	
h_J (Hs)	0.0001(2)	-0.0	-0.5	-0.2	-0.3	0.0	0.1	0.9	0.0	-0.2	-0.4	0.6	0.6	1.0
h_{JK} (Hs)	-0.0078(13)	0.2	-0.1	0.1	-0.2	0.4	-0.2	0.3	0.8	-0.2	0.1	0.2	0.3	0.3
h_K (Hs)	-0.0134(11)	-0.1	-0.0	-0.2	0.0	-0.3	0.0	-0.1	0.0	0.1	-0.1	-0.1	0.1	-0.1
L_J (mHs)	0.0001(2)	-0.5	-0.3	-0.3	-0.6	0.4	-0.3	-0.3	0.2	-0.8	0.4	-0.3	0.2	-0.3
L_{JK} (mHs)	0.0003(24)	-0.2	-0.4	-0.2	-0.3	-0.3	0.5	0.7	-0.1	-0.2	-0.7	0.9	-0.9	0.7
L_{JK} (mHs)	-0.0042(65)	0.1	0.3	0.1	0.3	0.1	-0.3	-0.6	0.1	0.2	0.6	-0.9	0.9	-0.7
L_{KKJ} (mHs)	0.0038(59)	-0.1	-0.3	-0.1	-0.3	0.0	0.2	0.5	-0.1	-0.2	-0.4	0.7	-0.7	0.6
L_K (mHs)	-0.0028(19)	0.1	0.2	0.1	0.2	-0.0	-0.1	-0.3	0.1	0.2	0.3	-0.4	0.5	-0.4
L_{LJ} (mHs)	0.0001(0)	-0.0	-0.0	-0.0	-0.0	-0.0	0.0	-0.0	0.0	0.0	-0.0	-0.0	0.1	-0.1
l_{JK} (mHs)	0.0003(9)	-0.0	0.2	-0.1	0.2	-0.2	-0.0	-0.5	-0.3	0.2	0.2	-0.6	0.7	-0.6
l_{LKJ} (mHs)	0.0003(1)	0.0	-0.1	0.1	-0.1	0.2	0.0	0.4	0.0	-0.1	-0.2	0.5	-0.6	0.5
l_K (mHs)	0.0007(8))	-0.1	0.0	-0.1	0.0	-0.2	0.0	-0.3	-0.1	0.0	0.2	-0.5	0.6	-0.4
h_{JK} (Hs)	-0.0078(13)	1.0												
h_K (Hs)	-0.0134(11)	-0.5	1.0											
L_J (mHs)	0.0001(2)	0.1	-0.1	1.0										
L_{JK} (mHs)	0.0003(24)	0.2	-0.2	-0.3	1.0									
L_{JK} (mHs)	-0.0042(65)	-0.3	0.4	0.2	-0.9	1.0								
L_{KKJ} (mHs)	0.0038(59)	0.3	-0.4	-0.1	0.8	-0.9	1.0							
L_K (mHs)	-0.0028(19)	-0.1	0.4	0.0	-0.7	0.8	-0.9	1.0						
L_{LJ} (mHs)	0.0001(0)	0.1	-0.2	-0.1	0.1	-0.0	0.0	-0.1	1.0					
l_{JK} (mHs)	0.0003(9)	-0.8	0.6	0.1	-0.7	0.8	-0.7	0.5	0.1	1.0				
l_{LKJ} (mHs)	0.0003(1)	0.5	-0.7	-0.1	0.7	-0.8	0.8	-0.7	0.1	-0.9	1.0			
l_K (mHs)	0.0007(8))	-0.5	0.4	0.1	-0.6	0.7	-0.7	0.6	0.0	0.8	-0.9			

Ən nəhayət fırlanma və mərkəzəqaçma həyəcanlaşması sabitləri, onların hesablanması xətalrı və bu parametrlərin həmin koordinat təsvirində hesablanmış korrelyasiya matrisləri cədvəl 2-də verilmişdir.

Dördüncü fəsildə mikrodalğa spektroskopiyasında molekulların strukturunun öyrənilməsində istifadə olunan əsas metodlardan danışılır və struktur parametrlərinin təyin olunmasında istifadə olunan ifadələr verilmişdir. Birinci paraqrafda D. Kreyçmen metodunun tam şərhı verilmiş, bu metodun çatışmayan cəhətləri göstərilmişdir. Burada həm də ətalət momentlərinin kvadratik funksiyalarının minimallaşdırılmasına əsaslanan və molekulun strukturunun onun əsas halının baş ətalət momentlərinin qiymətləri əsasında eyni zamanda istənilən saylı izotopəvəzləməli izotopomerlərinin baş ətalət momentlərindən istifadə edilərək ən kiçik kvadratlar üsulu ilə təyininə imkan verən Norsberqer metodu şərh edilmişdir. Göstərilmişdir ki, atomlar molekulun baş oxlarına yaxın yerləşdikdə bu üsul qeyri- müəyyənliyə gətirmir. Bu paraqrafda “qiymətləndirici ən kiçik kvadratlar metodu” kimi adlandırılan Karl metodu da geniş şərh olunub. Bu üsulda struktur parametrlərinin ən kiçik kvadratlar metodu ilə təyin olunma prosesində tədqiq olunan molekul ilə qohum olan molekulların da baş ətalət momentlərindən istifadə oluna bilər. Bu üsulla təyin olunan struktur parametrlərinin çoxluğu fırlanma sabitlərinin onların təcrübi təyin olunmuş qiymətlərindən minimal fərqlərlə seçilməsini həyata keçirməyə imkan verir.

Bu fəslin ikinci paraqrafı izopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ trans-konformerinin struktur parametrlərinin ən kiçik kvadratlar metodu ilə təyin olunmasına həsr olunub. Bu paraqrafda, həmçinin etil spirti molekulunun - CH_3CHOH trans-konformerinin struktur parametrlərinin ən kiçik kvadratlar metodu ilə təyin olunması da şərh olunub. Bu molekulun struktur parametrləri, onların təyin olunma xətalrı, həmçinin bu molekulun yaxınlaşdırma prosesində iştirak edən bütün izotopomerlərinin (13 izotopomer) təyin olunan struktur parametrləri əsasında hesablanmış fırlanma sabitləri və onların təcrübi təyin olunmuş qiymətləri verilmişdir. Sözü gedən paraqrafda yekunda izopropil spirti molekulunun - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ trans-konformerinin ən kiçik kvadratlar metodu ilə təyin olunan struktur parametrləri, onların təyin olunma xətalrı, bu parametrlərin korrelyasiya matrisi cədvəl 3-də verilmişdir.

Bu paraqrafda izopropil spirti molekulunun və onun izotopəvəzləməli analoqlarının təyin olunan struktur parametrləri əsasında hesablanmış fırlanma sabitləri və onların təcrübi təyin olunmuş qiymətləri verilmişdir.

Cədvəl 3

İzopropil spirti $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun struktur parametrləri və bu parametrlərin korrelyasiya matrisi

Rabitə uzunluqları ($\text{\AA}$ lə) və valent bucaqları (dərəcə ilə)	Qiymətlər	Korrelyasiya matrisi						
R(C-C)	1,518	1,00						
R(C-O)	1,449	0,966	1,00					
R(O-H)	0,950	0,344	0,121	1,00				
<CCC	113,190	-0,998	0,960	0,342	1,00			
<COH	107,953	0,687	-0,589	-0,696	-0,688	1,00		
<CCO	110,373	0,720	-0,864	0,324	-0,704	0,165	1,00	

Yekunda dissertasiyanın əsas nəticələri təqdim edilmişdir.

1. İzopropanol molekulunun santimetrik, millimetrik və submillimetrik fırlanma spektri tədqiq edilmişdir.
2. İlk dəfə olaraq izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin daxili fırlanma nəticəsində daha da mürəkkəbləşən fırlanma spektrlərini yüksək dəqiqliklə ifadə edən daxili fırlanma hamiltonianı nisbətən tam formatda (sektik mərkəzəqaçma əmsalları nəzərə alınmaqla) təklif edilmişdir.
3. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin 314 fırlanma keçidləri identifikasiya edilmişdir ki, bunlardan 130 keçid teraherslik dalğa uzunluğu diapazonuna düşür və 143-ü isə qadağan olunmuş keçiddir.
4. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün daxili fırlanma hamiltonianının kvadratik, kvartik mərkəzəqaçma sabitləri və tunnel parçalanma parametrləri xeyli dəqiqləşdirilmişdir.
5. İlk dəfə olaraq izopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin simmetrik və antisimmetrik halları üçün daxili fırlanma hamiltonianının sektik mərkəzəqaçma sabitləri təyin edilmişdir.

6. Daxili fırlanma hamiltonianının 37 parametri arasında korrelyasiya əmsalları təyin edilmişdir. Korrelyasiya əmsallarının çox kiçik olması təklif olunan daxili fırlanma hamiltonianının araşdırılan molekulun identifikasiya edilmiş spektrini kifayət qədər yaxşı ifadə etməsi faktını təsdiq edir.
7. İzopropil spirti molekulunun trans-konformerinin tədqiq edilən tezliklər diapazonunda fırlanma kvant ədədinin $J \leq 60$ –adək qiymətləri üçün 126 qadağan olunmuş keçidi identifikasiya edilmişdir.
8. İzopropanol molekulunun struktur parametrləri dəqiqləşdirilmişdir.
9. Molekulların fırlanma spektrlərinin identifikasiyasının bir sıra nəzəri və metodiki problemlərinin həlli üçün kompüter proqramları tərtib edilmişdir.

DİSSERTASIYANIN ƏSAS NƏTİCƏLƏRİ AŞAĞIDAKI İŞLƏRDƏ NƏŞR OLUNMUŞDUR

1. Каджар Ч.О., Мусаев С.А., Джафаров Дж. А., Мовсумов И.З., Каграманова Н.М. Миллиметровый спектр поглощения молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$. Препринт № 001 Институт Фотоэлектроники АН Азербайджана, Баку, 1997, с.32.
2. Каджар Ч.О., Кязимова С.Б., Джафаров Дж. А., Абдуллаев А.А., Алиев М.Е. Миллиметровый и субмиллиметровый спектры транс-конформеров молекул этилового и нормального пропилового спиртов. Труды Международной Конференции посвященной 75-летию академика А.М.Пашаева, Баку, 2004, с.213-215.
3. Кязимова С.Б., Джафаров Дж. А., Гасанова А.С. Запрещенные вращательные переходы транс-конформера молекулы нормального пропанола // АМЕА-nın Xəbərləri. Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, 2008, с. XXVII, № 2, с.109-112.
4. Адилев А.А., Джафаров Дж. А., Каджар Ч.О., Мусаев С.А. Спектры *gou*-конформера молекулы изopropanола в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн // Журнал Прикладной спектроскопии, 2008, т.75, № 5, с. 659-665.
5. Каджар Ч.О., Мусаев С.А., Гасанлы В.Э., Джафаров Дж. А. Структура молекулы этилового спирта // Докл. АН Азерб. ССР, 1982, т. 55, № 3-4, с. 114-119.

6. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелейев М.Р., Джафаров Дж.А. Оптимизация расчета параметров вероятной структуры газофазных молекул / Международная научная конференция МКО-205-011, г.Москва: 2015, с.19-22.
7. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелейев М.Р., Джафаров Дж.А. Микроволновый вращательный спектр молекулы изобутанола и особенности ее пространственного строения / Международная научная конференция МКО-205-011, г.Москва: 2015, с.15-18.
8. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелейев М.Р., Джафаров Дж.А. Стимулирование конформационных переходов в гетероизомерных молекулах / Международная научная конференция МКО-205-011, г.Москва: 2015, с.11-14.
9. Qacar Ç.O., Adilov A.Ə., Musayev S.A., Cəfərov C.Ə., Həsənova A.S. İzopropil spirti molekulunun qoş-konformerinin qadağan olunmuş rəqsi-fırlanma keçidləri // AMEA FIZIKA, sec.: Az, vol.XX, № 4, s. 24-26.
10. Адилев А.А., Джафаров Дж. А., Каджар Ч.О., Мусаев С.А., Казымова С.Б. Внутреннее вращение и миллиметровые переходы *gost*-конформера молекулы изопропанола. Баку: "Letterpress" ММС, 2009, 84 с.

ДЖАФАРОВ ДЖАЛИЛ АЛЕКПЕР ОГЛЫ

Центробежное искажение высокого порядка и запрещенные переходы во вращательных спектрах молекулы изопропанола

РЕЗЮМЕ

В диссертационной работе исследованы микроволновые вращательные спектры транс- и гош- конформеров молекулы изопропанола - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$. На гибридном радиоспектрометре был исследован миллиметровый спектр молекулы изопропилового спирта в диапазоне длин волн от 8 ГГц до 78 ГГц. Предложен и использован в сравнительно полном формате редуцированный гамильтониан молекул с внутренним вращением достаточно хорошо описывающий колебательно-вращательный спектр молекулы гош- конформера изопропилового спирта, усложненный внутренним вращением. Идентифицированы 314 вращательных и колебательно-вращательных переходов, спектральных линий молекулы гош-конформера изопропилового спирта, попадающих в миллиметровый диапазон длин волн, а также 130 спектральных линий этой молекулы попадающих в терагерцовый диапазон длин волн. Впервые предсказаны и обнаружены 143 запрещенные спектральные линии молекулы гош-конформера изопропилового спирта. Уточнены квартичные центробежные постоянные, для симметричного и асимметричного состояний молекулы гош-конформера изопропилового спирта. Впервые определены секстичные центробежные постоянные, для симметричного и асимметричного состояний в отдельности, и уточнены параметры туннельного расщепления для молекулы гош-конформера изопропилового спирта. Определены корреляции между 37 молекулярными параметрами. Резкое уменьшение значений большинства коэффициентов корреляции подтверждает факт, что предлагаемый гамильтониан однозначно описывает идентифицированный спектр исследуемой молекулы. Впервые теоретически, а затем и экспериментально рассмотрен вопрос о возможности существования во вращательном спектре транс-конформера этой молекулы запрещенных переходов. Для теоретической обработки вращательного спектра транс-конформера молекулы изопропилового спирта был использован

вращательный гамильтониан Ватсона A- редукции, включающий квартичные, секстичные и октичные центробежные термы. Удалось обнаружить во вращательном спектре исследуемой молекулы запрещенных переходов. Впервые предсказаны и обнаружены 126 запрещенных спектральных линий транс-конформера молекулы изопропилового спирта в указанном выше диапазоне частот до $J = 60$. За счет этого существенно уточнены вращательные и центробежные спектроскопические постоянные транс-конформера молекулы изопропанола. Вследствие идентификации переходов с высокими J и запрещенных переходов значительно уменьшены погрешности определения вращательных постоянных (приблизительно в 3-4 раза) и центробежных постоянных (почти на порядок). Уточненные в диссертационной работе спектроскопические параметры позволяют с высокой достоверностью описывать вращательный спектр исследуемой молекулы. Такое уточнение дает возможность в дальнейшем предсказывать, с высокой точностью, спектральные переходы молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ для более высоких J в любом диапазоне частот.

Существенно уточнены молекулярные и структурные постоянные молекулы изопропанола. Заново с большой точностью определены структурные постоянные молекулы этанола.

Jafarov Jalil

Abstract

High centrifugal distortion and forbidden rotational transitions of the rotational spectrums of molecule isopropanol

The thesis presents research of the microwave rotational spectra of trans- and gauche-conformers of isopropanol molecules ($(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$). The millimeter spectrum of isopropyl alcohol molecules has been studied by the hybrid radio spectrometer within the wavelength range from 18 to 78 GHz. A fully-comparative reduced Hamiltonian of molecules with the internal rotation, which sufficiently well characterizes the rotational spectrum of gauche-conformer of isopropyl alcohol molecules complicated by the internal rotation, has been suggested and used. 314 rotational and oscillatory-rotational transitions and spectral lines of gauche-conformer molecules of isopropyl alcohol falling into millimeter wavelength range, as well as 130 spectral lines of these molecules falling into THz wavelength range have been identified. For the first time, 143 forbidden spectral lines of gauche-conformer molecules of isopropyl alcohol have been forecasted and revealed.

Quartic centrifugal constants have been specified for symmetrical and asymmetrical conditions of gauche-conformer molecules of isopropyl alcohol. For the first time, sextic centrifugal constants have been defined for symmetrical and asymmetrical conditions; moreover, the parameters of tunnel splitting of gauche-conformer molecules of isopropyl alcohol have been specified. The correlation coefficients among 37 molecular parameters have been defined too. A sharp decrease of values of majority of correlation coefficients confirms the fact that the suggested Hamiltonian unambiguously characterizes the identified spectrum of the molecule studied. The issue of possible existence of forbidden transitions at the rotational spectrum of trans-conformer of this molecule has been firstly reviewed theoretically, and then practically for the first time.

For theoretical processing of the rotational spectrum of trans-conformer of isopropyl alcohol molecules, the rotational Hamiltonian of the Watson A-reductions, which included quartic, sextic and octic centrifugal terms, have been used. It was possible to find out the forbidden transitions in the rotational spectrum of the molecule under study. For the first time, 126 forbidden spectral

lines of trans-conformer of isopropyl alcohol molecules have been forecasted and revealed in the above-mentioned frequency range up to $J=60$.

The rotational and centrifugal spectroscopic constants of the trans-conformer of isopropanol molecules ($(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$) have been elaborated practically. The correlation matrix of these constants has been defined too. Correlation between spectroscopic constants has been decreased to a considerable extent. As a result of identification of transitions with higher J and forbidden transitions, the errors in determination of rotational constants and centrifugal constants have considerably decreased with about 3 to 4 times for the former, and almost on 1 order of the magnitude for the latter.

The spectroscopic parameters specified in this thesis enable to authentically characterize the rotational spectrum of the molecule under study. Such an elaboration makes it possible to further forecast with the highest accuracy the spectral transitions of the molecule ($(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$) for higher J at any frequency range. The molecular and structural constants of the isopropanol molecules have been elaborated practically. Once again, the structural constants of the ethanol have been defined with the highest accuracy.

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АЗЕРБАЙДЖАНА
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ**

На правах рукописи

ДЖАЛИЛ АЛЕКПЕР оглы ДЖАФАРОВ

**Центробежное искажение высокого порядка и запрещенные
переходы во вращательных спектрах молекулы изопропанола**

2203.01 —электроника

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

Диссертации на соискание ученой степени
доктора философии по физике

Баку – 2015