

# СТРУКТУРА ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ЛИНИЙ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ В ТРОЙНОЙ СМЕСИ

*Ф.Х.Тухватуллин, А.К.Атаходжаев,  
А.Жумабоев, У.Н.Ташкенбаев*

Экспериментально установленное сужение поляризованных линий спектров комбинационного рассеяния при разбавлении вещества в нейтральном растворителе использовано для разрешения структуры линии ассоциатов пиридина ( $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$ ) в смеси с бутиловым спиртом и гептаном. Этот же метод использован для разрешения структуры линии  $992 \text{ см}^{-1}$  смеси пиридин-хлороформ-гептан.

Ширина поляризованных составляющих линий комбинационного рассеяния (КР) в ряде случаев очень чувствительна к разбавлению вещества нейтральным растворителем<sup>1</sup>. Обычно наблюдается уменьшение ширины линии рассеяния – время колебательной релаксации увеличивается. Так, например, в наших опытах при разбавлении бензола или пиридина на нейтральным растворителем – гептаном ширина поляризованной линии  $992 \text{ см}^{-1}$  уменьшается в 2,5 раза<sup>2,3</sup>. В предельно разбавленном растворе пиридина и бензола с гептаном (соотношение молекул 1 : 50) ширина указанной линии составляет  $1 \text{ см}^{-1}$ . Это обстоятельство может быть использовано для улучшения разрешения близколежащих поляризованных линий КР, которые в чистой жидкости не разрешаются из-за большой полуширины. В самом

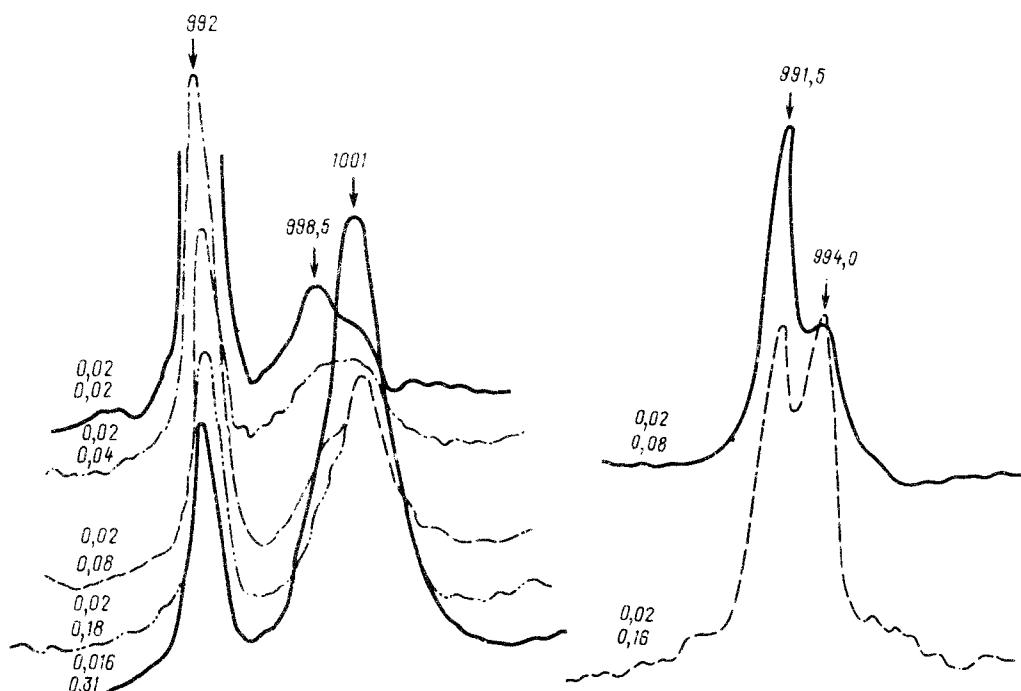


Рис.1

Рис.2

Рис. 1. Структура линии  $992 \text{ см}^{-1}$  пиридина в смеси с бутанолом и гептаном (содержание гептана до 1 м.д.)

Рис. 2. Линия  $992 \text{ см}^{-1}$  пиридина в тройной смеси пиридин- $\text{CHCl}_3$ -гептан (содержание гептана до 1 м.д.)

деле для данного спектрального аппарата разрешение спектральных линий кроме характеристики аппарата будет зависеть еще и от ширины спектральных линий. При уменьшении ширины спектральных линий их разрешение должно улучшиться. Нами применен этот метод для разрешения структуры линии  $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$  ассоциатов пиридина с бутиловым спиртом. Запись спектров производилась на спектрометре ДФС-52. Как известно между молекулами компонент этой смеси образуется межмолекулярная водородная связь <sup>4</sup>. В бинарной смеси кроме линии мономерных молекул  $992 \text{ см}^{-1}$  наблюдается также линия ассоциатов с волновым числом  $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$ . В бинарной смеси при увеличении содержания бутилового спирта, кроме уже известного увеличения интенсивности линии ассоциатов, наблюдается сначала ее уширение, затем линия проходит через максимум ширины и при дальнейшем разбавлении ширина этой линии уменьшается. Все это сопровождается смещением максимума этой линии в сторону больших частот на  $2,5 \text{ см}^{-1}$ . Для решения вопроса о структуре этой линии мы решили применить метод тройной смеси: смесь пиридина с бутиловым спиртом сильно разбавлялась гептаном. Результаты исследований приведены на рис. 1. Мы видим, что поляризованные линии и мономеров ( $992 \text{ см}^{-1}$ ) и ассоциатов ( $\sim 1000 \text{ см}^{-1}$ ) сильно сузились. В результате обнаружилась дублетная структура линии ассоциатов, причем соотношение интенсивностей компонент дублета с увеличением содержания бутанола меняется. Мы полагаем, что линия с волновым числом  $998,5 \text{ см}^{-1}$  соответствует ассоциатам пиридин-бутанол  $1 : 1$ , а линия  $1001 \text{ см}^{-1}$  более сложным ассоциатам. Метод тройной смеси позволил нам разрешить и структуру линии  $1030 \text{ см}^{-1}$  пиридина в смеси с бутанолом и гептаном. Эта линия также оказалась дублетной.

Применение описанного выше метода позволило нам решить также вопрос о протоно-донорной способности молекул хлороформа в смеси с пиридином <sup>5</sup>. В бинарной смеси хлороформ-пиридин заметно лишь уширение линии  $992 \text{ см}^{-1}$  и ее смещение в сторону больших частот. В тройной смеси удается разрешить структуру линии (рис. 2) — линия оказывается дублетной с характерным для образования водородной связи перераспределением интенсивностей линий с изменением содержания активных компонент.

#### Литература

1. Rodriguez A.A., Schwartz M. Spectrochimica Acta, 1988, **44**, 43.
2. Tukhvatullin F.H. et al. VII Annual EMLG Conference "Statistical mechanics of chemically reacting liquids",
3. Atakhodjaev A.K. et al. XXVI CSI Symposium, Sofia, 1989, p. 4.
4. Брадмюллер И., Мозер Г. Введение в спектроскопию комбинационного рассеяния. М., Мир, 1964, с. 628.
5. Пиментел Дж., Мак-Келлан О. Водородная связь. М., Мир, 1964, с. 462.

Самаркандский государственный университет  
им. А.Навои

Поступила в редакцию  
31 января 1990 г.