

AROMATIK UGLEVODORODLARDA MOLEKULALARARO O‘ZARO TA‘SIRLASHUVNING RAMAN SPEKTRLARIDA NAMOYON BO‘LISHI

Sherzodjon To‘lqin o‘g‘li Ahmedov

O‘zbekiston Milliy Universiteti
sherzodbek.ahmedov8883@gmail.com

Bahodir Xudoyberganovich Eshchanov

Toshkent viloyati Chirchiq davlat pedagogika instituti
bahodir.eshchanov@gmail.com

Jalol Baxtiyor o‘g‘li Shodmonov

O‘zbekiston Milliy Universiteti
jalol.95.10@mail.ru

ANNOTATSIYA

Suyuq aromatik uglevodorodlar - bromobenzol, dioksan, toluolning tebranish spektrlari Raman spektroskopiyasi yordamida keng chastota diapazonida o‘rganiladi. Atomlarning alohida guruhlarining burilish tebranishlarining namoyon bo‘lishi past chastotali spektrlar bo‘yicha olingan ma‘lumotlardan aniqlanadi. Benzol hosilalarida metil va galoid guruhlarining potentsial to‘siqlarini hisoblash uchun yarim empirik usuldan foydalanish imkoniyati ko‘rsatilgan.

Kalit so‘zlar: tebranish spektroskopiyasi, bromobenzol, dioksan, toluol, deformatsion tebranishlar, burilish tebranishlari, potentsial to‘siq.

APPEARANCE OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN AROMATIC HYDROCARBONS IN RAMAN SPECTRA

ABSTRACT

The vibrational spectra of liquid aromatic hydrocarbons – bromobenzene, dioxane, toluene - are studied in a wide frequency range by means of Raman spectroscopy. The manifestation of torsional vibrations of individual groups of atoms is established from the obtained data on the low-frequency spectra. The possibility of using a semiempirical method for calculating the potential barriers of methyl and halide groups in benzene derivatives is shown.

Keywords: vibrational spectroscopy, bromobenzene, dioxane, toluene, deformational vibrations, torsional vibrations, potential barrier.

KIRISH

Tebranma harakat spektroskopiyasi moddalarning suyuq holatini o'rganishning eng samarali eksperimental usullaridan biridir. Tebranma harakat spektroskopiyadan foydalanib, boshqa eksperimental tadqiqot usullari uchun ko'pincha mavjud bo'lmagan ma'lumotlarni olish mumkin. Tebranish spektri konturlariga molekulalararo o'zaro ta'sirlarning hissasini o'rganishga bag'ishlangan ko'plab nazariy va eksperimental ishlar [1-15] mavjud.

Molekulalarning tebranish spektrlari chiziqlarning maksimal joylashuvi, ularning intensivligi va shakli bilan tavsiflanadi. Molekulyar o'zaro ta'sirlar natijasida yuzaga keladigan ushbu parametrlarning o'zgarishini o'rganish suyuqliklarning tuzilishi va ularda nisbatan uzoq yashaydigan molekulyar komplekslar va assotsiatsiyalar mavjudligi to'g'risida ma'lumot olish imkonini beradi [16-18], shuningdek molekulyar dinamikani o'rganishga imkon beradi. Suyuqliklardagi molekulalararo o'zaro ta'sirlar molekulalardagi atomlararo bog'lanish kuch konstantalarining o'zgarishiga olib keladi.

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.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

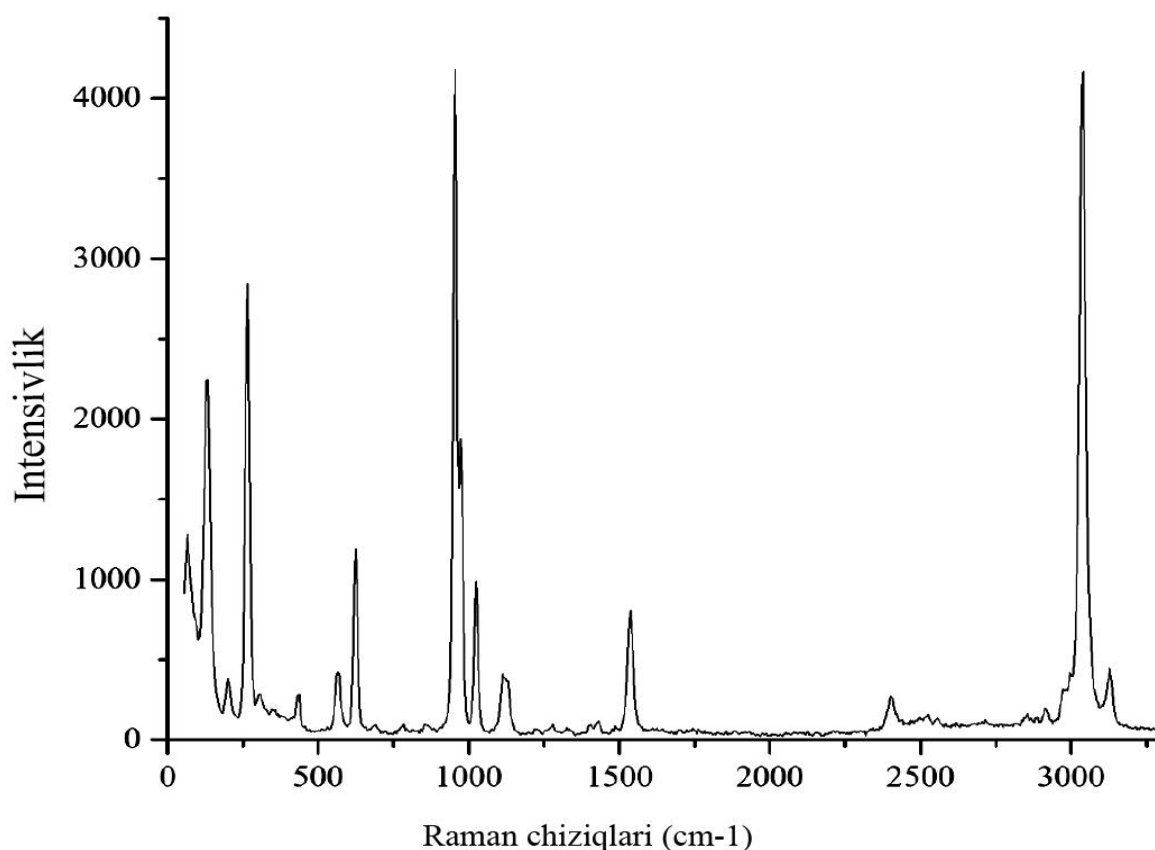
Bu o'zgarishlar atomlarning tebranishlariga mos keladigan chiziqlarda aniq kuzatiladi, ular orqali assotsiatsiyadagi molekulalar orasidagi o'zaro ta'sir yuzaga keladi. Bunday lokal muhitlarning xilma-xilligi spektrda bir nechta diskret siljishli chiziqlar mavjudligiga olib keladi, ularning soni suyuqlikda hosil bo'lgan assotsiatsiyalar turlarining soni bilan belgilanadi. Ushbu spektral chiziqlarning intensivligi suyuqlikdagi ushbu turdagi assotsiatsiyalarning konsentratsiyasiga bog'liq [9, 10, 18, 19].

Tebranish spektrlarining past chastotali qismi, xususan, molekulalarning burilish harakat tebranishlarni o'z ichiga oladi. Shuni ta'kidlash kerakki, murakkab molekulalarning atom guruhlarining burilish harakat tebranishlarini o'rganish molekulalarda ta'sir qiluvchi kuchlarni tushunish uchun katta ahamiyatga ega. Burilish harakati chastotalari haqidagi ma'lumotlar molekulalarning termodinamik funktsiyalarini statistik hisoblash uchun zarur bo'lib, termodinamik funktsiyalarning aniq qiymatlari

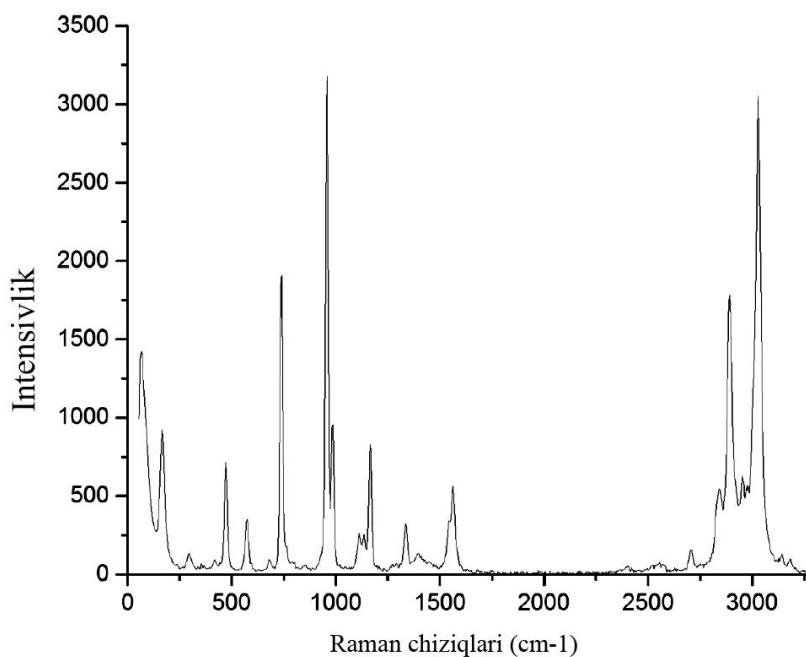
1-rasm. Raman spektrlarini qayd qilish uchun eksperimental qurilma sxemasi:

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

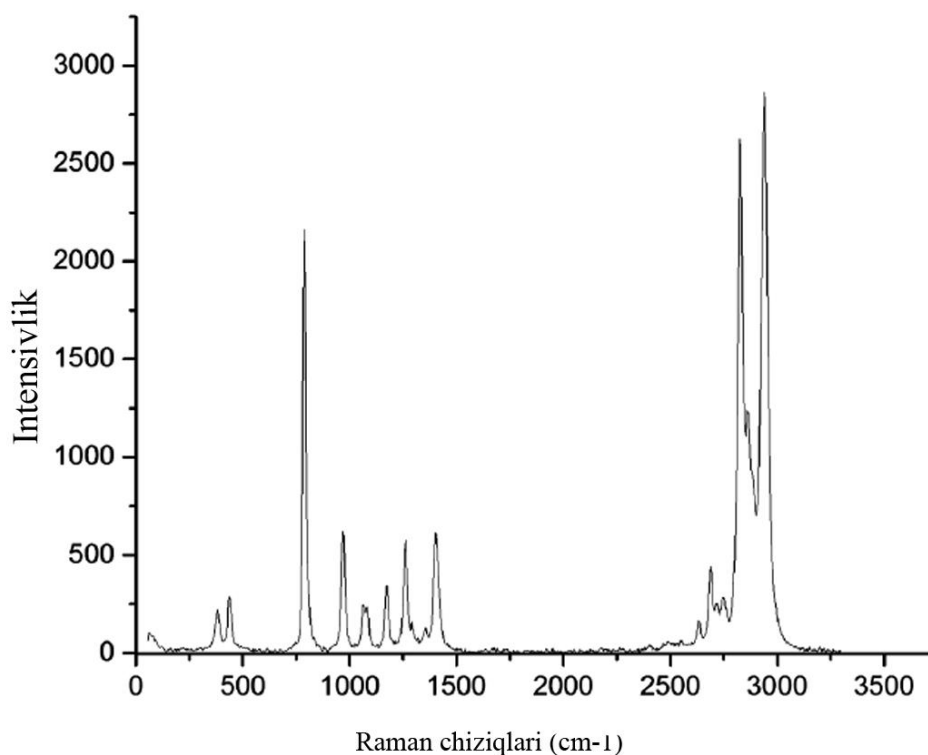
O‘rnatish $50\text{-}7000\text{ cm}^{-1}$ spektral diapazonda skanerlash mexanizmiga ega, fokus uzunligi 250 mm bo‘lgan spektrometrdan (07) iborat bo‘lib, uch xil avtomatik o‘zgaruvchan diffraksiyon panjaralar (1 mm uchun 600; 1200; 1800 ta chiziq) , o‘lchamlari 1 cm^{-1} va CCD (08) kamera -60°C haroratgacha 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 brombenzolning Raman spektri



3-rasm. Suyuq toluolning Raman spektri



4-rasm. Suyuq dioksanning Raman spektri

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

NATIJAR VA MUHOKAMALAR

50–3300 cm^{-1} spektral diapazondagi sof suyuq brombenzol, toluol va dioksanning ro'yxatga olingan Raman spektrlarining umumiy ko'rinishi mos ravishda 2–4-rasmlarda keltirilgan. Tekshirilayotgan suyuqliklarning ro'yxatga olingan chiziqlari va ularning intensivligi uchun maksimumlarning qiymatlari 1-jadvalda keltirilgan.

Bromobenzol - $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$		Dioksan - $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$		Toluol - $\text{C}_6\text{H}_5(\text{CH}_3)$	
ν, cm^{-1}	$\Im, (\text{a.u.})$	ν, cm^{-1}	$\Im, (\text{a.u.})$	ν, cm^{-1}	$\Im, (\text{a.u.})$
177	980	434	87	215	379
211	231	486	133	345	64
310	1745	835	1249	465	41
481	187	852	125	518	439
613	389	1016	305	620	165
668	696	1111	107	728	19
998	2530	1130	110	785	1300
1018	1592	1218	152	1002	2371
1068	826	1306	245	1030	650
1156	175	1338	58	1155	122
1165	344	1394	50	1179	105
1580	261	1443	235	1210	508
3077	1710	2671	77	1379	162
3142	196	2729	193	1586	136
		2785	121	1604	232
		2868	975	2442	102
		2902	464	2743	86
		2978	977	2876	216
				2931	763
				2993	258
				3019	186
				3065	1301
				3158	56
				3186	43

1-Jadval. Brombenzol, dioksan va toluolning qayd qilingan spektrlarida Raman spektral sohalarining maksimal chastota va intensivligi

Molekulyar spektroskopiya sharoitida ko'p atomli va bir atomli molekulalar o'rtasidagi xarakterli farq shundaki, kamida

uchta atomdan iborat bo'lgan barcha molekulalarda harakat atomlarga qaraganda murakkabroqdir. Boshqacha aytganda, elektronlar harakati bilan bir qatorda molekulaning tebranish (yadrolarning joylashishiga nisbatan davriy o'zgarishlar) va aylanish (orientatsiyaning davriy o'zgarishi) harakatlari muhim rol o'ynaydi.

Suyuqliklardagi molekulalarning tebranish relaksatsiyasi asosan molekulalararo o'zaro ta'sirlar bilan belgilanadi. Molekulyar tebranishlarda relaksatsiyaning uch mexanizmi ajralib turadi:

- energiya relaksatsiyasi, bu molekula ichidagi tebranishlar energiyasini harakatning boshqa barcha erkinlik darajalariga, shu jumladan molekulalarning translatsion va aylanish harakatlariga va boshqa tebranish rejimlariga tarqalishi;
- faza relaksatsiyasi, ya'ni atrofdagi molekulalar bilan to'qnashuv yoki boshqacha aytganda, mahalliy maydon tebranishlari orqali molekula ichidagi tebranishlarning fazaviy modulyatsiyasi;
- rezonans energiya almashinuvi - bir xil turdagi ossilatorlar o'rtasida molekula ichidagi tebranishlarning energiya kvantlarining almashinuvi.

Hozirgacha o'rganilgan suyuqliklarning ko'pchiligida fazali relaksatsiya tebranish relaksatsiyasining dominant mexanizmi hisoblanadi. Rezonans energiya almashinuvi kuchli molekulalararo o'zaro ta'sirga ega bo'lgan sof suyuqliklardagi spektral chiziq konturlari shakliga sezilarli ta'sir ko'rsatishi mumkin. Uning suyuqlik molekulalari tebranish spektrlarida namoyon bo'lishi ko'plab nazariy va eksperimental ishlarda o'rganilgan (masalan, [25, 26]). Aniqlanishicha, kuchli molekulalararo o'zaro ta'sirga ega suyuqliklarda spektral chiziq konturlarining kengayishi bilan bir qatorda, rezonans energiyaning uzatilishi Raman schilishning izotrop va anizotropik spektrlaridagi bir xil tebranish chiziqlari maksimumlari pozitsiyalari o'rtasida nomuvofiqlikni keltirib chiqarishi kerak.

Anizotrop spektrdagi (v_{aniz}) diapazonning maksimal chastotasi izotropikdan (v_{iz}) yuqori bo'lishi kerak va chastotalar farqi $\Delta v = v_{aniz} - v_{iz}$ musbat bo'lishi kerak. Bu nomuvofiqlik effekti ko'plab suyuqliklarda topilgan, va uni rezonans energiya almashinuvining namoyon bo'lishi bilan izohlash umumiy qabul qilingan. Δv ning kuzatilgan eksperimental qiymati odatda bir nechta to'lqin sonidan oshmaydi.

Bizning eksperimental ma'lumotlarimizga ko'ra, bromobenzolda C-Br, toluolda C-H va dioksanda C-O ning Raman chiziqlari murakkabdir. Brombenzol uchun taxminan 177 cm^{-1} , 310 cm^{-1} , 998 cm^{-1} va 3077 cm^{-1} chastotali to'rtta asosiy diapazonni ajratish mumkin. Eng asosiy chiziq 3077 cm^{-1} bo'lib, uning fonida nisbatan past intensivlikdagi 3142 cm^{-1} chastotali chiziq yotadi. Bu shuni ko'rsatadiki, bu barcha chiziqlar bir xil C

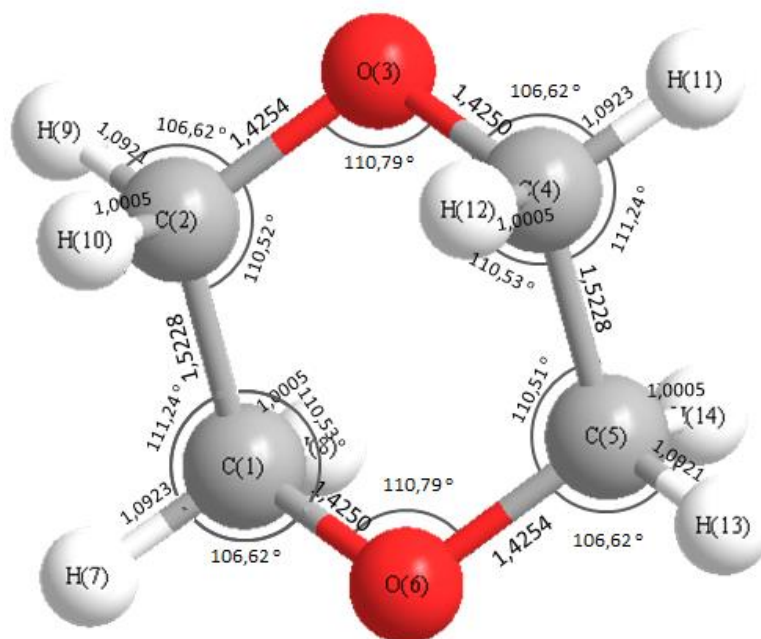


= H tebranishlari bilan bog'liq bo'lishiga qaramay, ularning depolarizatsiya koeffitsientlari har xil. Umumiy tuzilish xususiyatlariga ega bo'lgan birikmalarning spektrlarini taqqoslashda ma'lum bo'ldiki, ba'zi hollarda chastotalar bilan birga boshqa parametrlar - intensivlik, kenglik va depolarizatsiya darajasi - bir molekuladan ikkinchisiga o'tishda o'z qiymatini saqlab qoladi.

Natijalarimiz shuni ko'rsatdiki, molekularning bir qator o'xshash birikmalarda takrorlanadigan har bir shoxlanishi yoki boshqa strukturaviy xususiyatlari ularning spektrlarida xarakterli chiziqlar paydo bo'lishiga olib kelmaydi. Raman spektrlarida faqat ayrim o'ziga xos atomlar yoki bog'lar guruhlari (ba'zi hollarda alohida atomlar va bog'lanishlar) xarakterli chiziqlarga ega.

Xarakterli strukturaviy elementlarning alohida roli ular molekularning strukturaviy birliklari bo'lib, ular tebranishlar orqali Raman spektrlarida namoyon bo'ladi. Agar o'rganilayotgan molekulada bir nechta bir xil xarakterli strukturaviy elementlar mavjud bo'lsa, u holda ularga tegishli xarakterli chiziqlarning chastotalari ko'p hollarda mos keladi. Binobarin, mos keladigan chiziqlarning intensivligi bunday strukturaviy elementlarning soniga mutanosibdir. Bu hodisa toluolning CH_3 guruhining cho'zilish tebranishlariga tegishli bo'lgan chiziqlar misolida yaxshi yoritilgan, ular ikkita $\text{C} = \text{C}$ bog'lanishga ega. Ushbu birikma spektrida 1210- cm^{-1} chiziqning intensivligi 508 nisbiy birlikka teng, bir $\text{C} = \text{C}$ bog'langan dioksan spektrlarida esa mos keladigan chiziqning intensivligi 152 ga teng (1-jadvalga qarang.).

Agar molekula o'zgarishi bilan asosiy xarakterli strukturaviy elementning tebranishlari o'zgargan bo'lsa, u holda spektrda boshqa xarakterli elementlarning chiziqlari aniqroq namoyon bo'ladi. Xarakterli strukturaviy elementlarni ularga xos xarakterli chiziqlar to'plami bilan aniqlash Raman spektrlari va molekula tuzilishi o'rtasidagi bog'liqlikni o'rnatish yo'lidagi birinchi qadamdir. Ikkinchi bosqich - murakkab molekularidagi alohida atom guruhlarning burilish tebranishlarining qonuniyatlarini o'rganish. Murakkab molekularidagi alohida atom guruhlarning burilish tebranishlari tebranish spektrlarining past chastotali hududida (50 dan 500 cm^{-1} gacha) namoyon bo'ladi.



5-rasm. Dioksan molekulasini uchun bog‘lanish uzunliklari va bog‘lar orasidagi burchaklar.

2-4-rasmlardan ko‘rinib turibdiki, o‘rganilayotgan ob’ektlarning qayd qilingan Raman spektrlarining past chastotali hududida ($100\text{-}600\text{ cm}^{-1}$) sezilarli miqdordagi chiziqlar qayd etilgan. Strukturaviy formulaga ko‘ra, CH_3 guruhining burilish tebranishlariga qo‘shimcha ravishda (177 cm^{-1} , 244 cm^{-1} , 310 cm^{-1} - bromobenzol uchun; 434 cm^{-1} , 486 cm^{-1} - dioksan uchun; 215 cm^{-1} , 345 cm^{-1} , 465 cm^{-1} - toluol uchun), spektrlarda deformatsion tebranishlar kuzatilishi mumkin.

Tahlil shuni ko‘rsatadiki, kuzatilayotgan zonalarni izohlash, xususan, past chastotali Raman diapazonlarini burilish tebranishlariga maxsus nazariy tahlillarsiz belgilash qiyin, chunki bu suyuqliklarning tebranish spektrlari juda murakkab. Shuning uchun o‘rganilayotgan suyuqliklardagi metil guruhlarning burilish chastotalarini hisoblash yarim empirik usul bilan amalga oshirildi.

Agar burilish tebranishlarining potentsial to‘siq‘ining balandligi ma‘lum bo‘lsa, mos keladigan chastotani topish va hisoblangan qiymatlarni eksperimental kuzatilganlar bilan taqqoslab, burilish tebranishlarining chastotalarini aniqlash qiyin emas. Metil bilan almashtirilgan molekular uchun adabiyotda burilish tebranishlarining potentsial to‘siq‘ balandligi haqida ishonchli ma‘lumotlar yo‘q. Shuning uchun ksilenlardagi potentsial to‘siqlarni va burilish tebranishlarining mos chastotalarini nazariy jihatdan hisoblashga harakat qilindi [27].

Modda	ν, cm^{-1}
-------	-----------------------

	Tajriba	Hisoblash
Bromobenzol	266	254
Dioksan	382	369
Toluol	296	304

2-Jadval. Burilish tebranishlarining hisoblangan yakuniy tajriba chastotalari

Hisoblashning yarim empirik usullari potentsial to'siqlarning balandligi eng kichik va eng katta repulsiyaga ega bo'lgan holatlarda molekulaning ikkala aylanadigan qismi orasidagi repulsiya energiyalari farqiga teng degan taxminga asoslanadi. To'siqlarni yarim empirik hisoblashning bir necha usullari mavjud.

Biz potentsial to'siqlarni hisoblash uchun yarim empirik usuldan foydalandik, ammo biz bu usulni murakkabroq molekullarga tadbiq qilish uchun kvant kimyoviy hisob-kitoblari orqali sezilarli darajada o'zgartirdik. O'rganilayotgan molekullar uchun potentsial to'siqlar [27] da taklif qilingan potentsial repulsiya yordamida hisoblab chiqilgan. Mikroto'lqinli ma'lumotlardan ishonchli tarzda aniqlangan to'siq qiymatlaridan va kvant kimyoviy hisob-kitoblari bilan aniqlangan aniq strukturaviy ma'lumotlardan (bog'lanish uzunligi va burchaklari) ham foydalandik. Misol tariqasida dioksaning molekullararo o'zaro ta'sirini o'z ichiga olgan kvant - kimyoviy hisoblari natijalari 5-rasmda ko'rsatilgan.

Ikkinchisi atomlararo masofaning o'zgarishi tufayli potentsial qiymatlarning keskin o'zgarishi juda muhimdir. Bizning hisob-kitoblarimiz shuni ko'rsatdiki, [23] dan o'rganilayotgan molekullar uchun vodorod atomlari orasidagi repulsiya funksiyasidan foydalaniladi:

$$U = 950,5 \exp(-1,98r) - 1995 \exp(-3,7r), \quad (1)$$

bu yerda r - angistruumlardagi vodorod atomlari orasidagi masofa, ko'p hollarda boshqa atomlar orasidagi o'zaro ta'sirni hisobga olmagan holda, tajriba ma'lumotlari bilan qoniqarli moslashuvni beradi. O'rganilayotgan moddalar uchun burilish tebranishlarining hisoblangan chastotalari va tegishli tajriba qiymatlari 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadvaldan ko'rinib turibdiki, hisoblangan va eksperimental chastota qiymatlari qoniqarli mos tushadi. Bunday holda, potentsial to'siqlarning balandligi U va burilish tebranishlarining chastotasi ν o'rtasidagi bog'liqlik quyidagicha bo'ladi:

$$\nu = \frac{3}{2\pi c} \sqrt{\frac{U}{2}} \quad (2)$$

Hisob-kitoblar uchun burilish tebranishlari uchun kamaytirilgan inersiya momenti ni ham bilish kerak. Agar bizda nosimmetrik yuqori turdagi molekula mavjud bo'lsa, inersiya momentining kamayish ifodasi [28]

$$I_r = \mathfrak{I}_\varphi \left(1 - I_\varphi \sum_i \frac{K_i^2}{I_i} \right) \quad (3)$$

bu yerda $i = 1, 2, 3$; I_i – butun molekula inertsiyasining asosiy momentlari; K_i – bosh inersiya o'qlari bilan tepa o'qi hosil qilgan burchaklarning yo'nalish kosinuslari; I_φ – tepaning aylanish o'qiga nisbatan inersiya momenti. Bir nechta nosimmetrik aylanuvchi guruhlar ishtirokida burilish tebranishlarining inersiya momentining kamayishi masalasi [29] da ko'rib chiqildi.

XULOSA

O'rganilgan aromatik uglevodorodlarning Raman spektrlarining past chastotali qismi - brombenzol, dioksan va toluol juda ko'p sonli chiziqlardan iborat bo'lganligi sababli, kuzatilgan diapazonlarni belgilash va butun spektrlarni maxsus nazariy tahlilsiz izohlash ancha qiyin. Bunday murakkab spektr sohalarida burilish tebranishlari bilan bir qatorda deformatsion tebranishlar ham kuzatiladi. Agar og'irroq guruhlarni o'z ichiga olgan molekulalar uchun spektrning eng past chastotali sohasida joylashgan chiziqlar odatda burilish tebranishlari bilan bog'liq bo'lsa, metil guruhlarning burilish tebranishlari holatida tegishli chiziqlar nisbatan keng spektrli 500 cm^{-1} sohada yotishi mumkin. Buning sababi, metil guruhining inersiya momenti kichikdir. Eksperimental ma'lumotlarni hisobga olgan holda, tekshirilayotgan moddalarning ma'lum bir guruhini ba'zi bir o'ziga xos belgilar bilan ajratish qiyinligi aniq. Past chastotali sohada kuzatilgan spektral chiziqlar turli xil kenglik va intensivlikka ega.

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. A.J. Lock, H.J. Bakker. Temperature dependence of vibrational relaxation in liquid H₂O. *J. Chem. Phys.* 117, 1708 (2002).
7. 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).
8. 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).
9. 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).
10. 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).
11. 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).
12. Jr. C.W. Bauschlicher, A. Ricca. On the calculation of the vibrational frequencies of C₆H₄. *Chem. Phys. Lett.* 566, 1 (2013).
13. 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).
14. 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).
15. 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).
16. V. Pogorelov, A. Yevglevsky, I. Doroshenko, L. Berezovchuk, Yu. Zhovtobryuch. Nanoscale molecular clusters and vibrational relaxation in simple alcohols. *Superlattices and microstructures* 44, 571 (2008).



17. A. Vasylieva, I. Doroshenko, Y. Vaskivskiy, Y. Chernolevska, V. Pogorelov. FTIR study of condensed water structure. *J. Mol. Struct.* 1167, 232 (2018).
18. V. Pogorelov, Y. Chernolevska, Y. Vaskivskiy. Structural transformations in bulk and matrix-isolated methanol from measured and computed infrared spectroscopy. *J. Mol. Liq.* 216, 53 (2016).
19. I. Doroshenko, V. Balevicius, G. Pitsevich, K. Aidas, V. Sablinskas, V. Pogorelov. FTIR/PCA study of propanol in argon matrix: The initial stage of clustering and conformational transitions. *Fiz. Nizk. Temp.* 40, 1384 (2014).
20. R.L. Redington. The infrared spectrum and barriers hindering internal rotation in H₂S₂, CF₃SH, and CF₃SD. *J. Mol. Spectr.* 9, 469 (1962).
21. B. Eshchanov, Sh. Otajonov, Kh. Rakhmatullaeva. Application of Raman scattering of light to study the structure of molecules. *Intern. J. Sci. & Engin. Research.* 9, 1532 (2018).
22. G.A. Pitsevich, I.Yu. Doroshenko, V.Ye. Pogorelov, E.N. Kozlovskaya, T. Borzda, V. Sablinskas, V. Balevicius. Long-wave Raman spectra of some normal alcohols. *Vibr. Spectroscopy.* 72, 26 (2014).
23. Sh. Otajonov, B. Eshchanov, A. Isamatov. Manifestation of substance molecular structure in temperature effects of light scattering. *J. Chem. Chem. Engin.* 7, 791 (2013).
24. A. Weissberger, jr., E.S. Proskauer, J.A. Riddik, E.E. Toops. *Organic Solvents, Physical Properties and Methods of Purification* (Interscience, 1955).
25. B. Desbat, P. Huong. Structure of liquid hydrogen fluoride studied by infrared and Raman spectroscopy. *J. Chem. Phys.* 78, 6377 (1983).
26. D.E. Logan. On the isotropic Raman spectra of isotopic binary mixtures. *Mol. Phys.* 58, 97 (1986).
27. V. Magnasco. An empirical method for calculating barriers to internal rotation in simple molecules. *Il Nuovo Cimento.* 24, 425 (1962).
28. B.L. Crawford. The partition functions and energy levels of molecules with internal torsional motions. *J. Chem. Phys.* 8, 273 (1940).
29. W.G. Fateley, F.A. Miller. Torsional frequencies in the far infrared – II: Molecules with two or three methyl rotors. *Spectrochim. Acta.* 18, 977 (1962).

