

DEPOLYARIZATSIYALANGAN FLUORESSENSIYA NAZARIYASIDA MOLEKULALAR AYLANMA DIFFUZIYASI VA ULARNING FRAGMENTLARINING CHEKLANGAN HARAKATINI HISOBGA OLISH

A.S. Abdurazzoqova

Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti.

Samarqand, O'zbekiston.

<https://doi.org/10.5281/zenodo.20600915>

Annotatsiya. Ushbu maqolada depolyarizatsiyalangan fluoressensiya nazariyasida molekulalarning aylanma diffuziyasi va ularning fragmentlarining cheklangan aylanma harakati o'rganilgan. Molekulaning orientatsion relaksatsiyasi hamda fluoressensiya anizotropiyasining vaqt bo'yicha o'zgarishini tavsiflash uchun cheklangan aylanma diffuziya modeli qo'llanilgan.

Orientatsion korrelyatsion funksiyalar sferik garmonikalar usuli yordamida hisoblangan.

Olingan natijalar molekulalarning ichki dinamikasini tavsiflash hamda depolyarizatsiyalangan fluoressensiya spektrlarini tahlil qilishda muhim ahamiyatga ega ekanligi ko'rsatildi.

Kalit so'zlar: aylanma diffuziya, cheklangan aylanma harakat, fluoressensiya anizotropiyasi, orientatsion relaksatsiya, korrelyatsion funksiyalar, depolyarizatsiyalangan fluoressensiya.

Kirish

Molekulalarning orientatsion harakati molekulyar spektroskopiya va statistik fizikaning muhim tadqiqot obyektlaridan biri hisoblanadi. Kondensirlangan muhitlarda molekulalar va ularning fragmentlari erkin aylanmaydi, balki atrofdagi molekulalar ta'siri tufayli ma'lum darajada cheklangan harakat qiladi. Bunday holat molekulalarning optik xossalariga, xususan, fluoressensiya depolyarizatsiyasiga sezilarli ta'sir ko'rsatadi.

Depolyarizatsiyalangan fluoressensiya usuli biologik makromolekulalar, polimerlar, suyuq kristallar va murakkab organik tizimlarning ichki dinamikasini o'rganishda keng qo'llaniladi.

Mazkur usul yordamida molekulalarning orientatsion relaksatsiya vaqtlari hamda harakatchanlik darajasini aniqlash mumkin. Shu sababli molekulalar harakatining adekvat nazariy modelini yaratish dolzarb ilmiy masala hisoblanadi.

Tadqiqot metodikasi

Molekulalar fragmentlarining harakati cheklangan aylanma diffuziya ("wobbling-in-a-cone") modeli yordamida tavsiflandi. Ushbu modelga ko'ra molekula fragmenti ma'lum yarim burchakka ega bo'lgan konus ichida tasodifiy Brouncha aylanma harakatni amalga oshiradi.

Orientatsion ehtimollik zichligi quyidagi aylanma diffuziya tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$\frac{\partial \Psi(\Omega, t)}{\partial t} = D_r \nabla_{\Omega}^2 \Psi(\Omega, t)$$

bu yerda (D_r) – aylanma diffuziya koeffitsienti.

Tenglamaning yechimlari sferik garmonikalar va Lejandr funksiyalari yordamida topildi.

Natijada orientatsion korrelyatsion funksiyalar quyidagi umumiy ko'rinishda olindi:

$$G_l(t) = \sum_n A_n^{(l)} \exp \left[-\nu_n^{(l)} \left(\nu_n^{(l)} + 1 \right) D_r t \right]$$

Mazkur funksiyalar molekulaning boshlang'ich va keyingi orientatsion holatlari orasidagi bog'lanishni tavsiflaydi hamda relaksatsiya jarayonlarini aniqlash imkonini beradi.

Natijalar va muhokama

Nazariy hisoblashlar shuni ko'rsatdiki, cheklangan aylanma diffuziya molekulaning orientatsion relaksatsiya vaqtlariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Konusning ochilish burchagi kamaygan sari molekula fragmentining harakatchanligi pasayadi va korrelyatsion funksiyalarning so'nishi sekinlashadi.

Fluoressensiya anizotropiyasining vaqt bo'yicha o'zgarishi quyidagi eksponensial qonuniyat bilan tavsiflanadi:

$$r(t) = r_0 G_2(t)$$

Yoki;

$$r(t) = r_0 \sum_n A_n^{(2)} \exp \left[-\nu_n^{(2)} (\nu_n^{(2)} + 1) D_r t \right]$$

bu yerda (r_0) – boshlang'ich anizotropiya, t esa orientatsion relaksatsiya vaqti.

Cheklangan harakat sharoitida esa anizotropiya to'liq yo'qolmaydi va ma'lum qoldiq qiymatga ega bo'ladi. Bu holat biologik makromolekulalar va polimer tizimlarida kuzatiladigan eksperimental natijalar bilan mos keladi.

Hisoblashlar natijasida infraqizil yutilish va depolyarizatsiyalangan fluoressensiya spektrlarining shakli molekulaning umumiy aylanma diffuziyasi hamda fragmentlarning ichki harakati bilan aniqlanishi ko'rsatildi. Spektral chiziq shakli turli relaksatsion mexanizmlarga mos keluvchi Lorens funksiyalari superpozitsiyasi sifatida tavsiflanadi.

Olingan natijalar molekulyar harakatning optik xossalarga ta'sirini chuqurroq tushunish imkonini beradi va eksperimental ma'lumotlarni talqin qilishda muhim nazariy asos vazifasini bajaradi.

Xulosa

1. Molekulalar va ularning fragmentlarining cheklangan aylanma harakatini tavsiflovchi nazariy model ishlab chiqildi.
2. Cheklangan aylanma diffuziya tenglamalari asosida orientatsion korrelyatsion funksiyalar hisoblandi.
3. Fluoressensiya anizotropiyasining vaqt bo'yicha o'zgarishi molekulaning ichki harakatchanligiga bog'liq ekanligi aniqlandi.
4. Spektral chiziqlarning shakli va yarim kengligi diffuziya parametrlariga sezilarli darajada bog'liq ekanligi ko'rsatildi.
5. Olingan natijalar molekulyar spektroskopiya, biofizika va polimerlar fizikasi sohalarida qo'llanishi mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Debye P. *Polar Molecules*. New York: Dover Publications, 1929.
2. Lipari G., Szabo A. Model-free approach to the interpretation of nuclear magnetic resonance relaxation in macromolecules // *Journal of the American Chemical Society*. – 1982. – Vol.104. – P.4546–4559.
3. Perrin F. Mouvement brownien d'un ellipsoide // *Journal de Physique et le Radium*. – 1934. – Vol.5. – P.497–511.
4. Levshin V.L. *Fluorescence and Molecular Dynamics*. Moscow: Nauka, 1980.
5. Lakowicz J.R. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. 3rd Edition. New York: Springer, 2006.