



**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU**

**Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondu ilə
Belarus Respublika Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
birgə elmi-tədqiqat layihələrinin və proqramlarının
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
1-ci Azərbaycan-Belarus beynəlxalq müsabiqəsinin
(EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013) qalibi olmuş layihənin
yerinə yetirilməsi üzrə**

YEKUN ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: **Atmosferin ekologiyası və astrofizika üçün maraq kəsb edən çoxatomlu molekulların fırlanma spektroskopiyası metodlarının inkişafı**

Qrantın məbləği: **80 000 manat**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Kazımova Səkinə Bəhmən qızı**

Layihənin nömrəsi: **EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/04/1-M-02**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **14.08.2013**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **24 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01.09.2013 - 01.09.2015**

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

Diqqət! Uyğun məlumat olmadığı təqdirdə müvafiq bölmə boş buraxılır

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

- | | |
|---|---|
| 1 | Layihənin həyata keçirilməsi üzrə yerinə yetirilmiş işlər, istifadə olunmuş üsul və yanaşmalar
(burada doldurulmalı)
1. İzobutanol molekuluunun spektral udma xətlərinin kataloqu (18-70 QHs diapazonunda) tərtib edilmişdir.
2. Müasir mikrodalğa fırlanma spektroskopiyaya üsullarının və riyazi kompyuter modelləşdirici proqramlarının tətbiqi həyata keçirilmişdir.
3. Karbohidrogen əvəzedicilərin qeteroizomer molekullarının ayrı-ayrı konformerlərinin mikrodalğa fırlanma spektrlərinin, konformasion enerji səviyyələrinin statistik çəkilərinin məqsədyönlü dəyişməsinə |
|---|---|

əsaslanan identifikasiyası üsulunun nəzəri əsasları işlənmiş, bu üsulun tətbiqinin konkret mexanizmi təklif edilmişdir.

4. Qeteroizomer molekulların konformasion enerji səviyələrinin anlayışı irəli sürülmüş, ayrı-ayrı stabil konformerlərin konformasion enerji səviyələrinin arasında olan enerji fərqinin elektromagnit dalğaların infraqırmızı diapazonunda yerləşməsi müəyyən edilmiş, bunun əsasında İQ-MD ikiqat kvant rezonansları üsulunun tətbiqi yolu ilə istənilən izomerin mikrodalğa fırlanma spektrinə daxil olan bütün udma xətlərinin intensivliklərinin dəyişməsinin mümkünlüyü əsaslaşdırılmışdır.

5. İzobutanol molekulunda zəif C-H...OH tipli molekul daxili hidrogen əlagəsinin mövcudluğu aşkar edilib və onun molekulun daxili fırlanma potensialına təsiri tədqiq olunub və təsdiqlənmişdir.

6. İzobutanol molekulunda C-H...O-H tipli molekul daxili hidrogen əlagəsi ilə stabilləşdirilən fırlanma izomerinin mikrodalğa spektri aşkar edilərək tədqiq edilib. İzomerin həndəsi quruluşu, statistik çəkisi və müvafiq elektrik xassələri müəyyən edilmişdir.

7. Ətraf mühitin ekologiyanı ziyan vuran maddələrin ən kiçik kütlələri tərəfindən yaradılan və aşkar edilə bilən molekulyar aşağıayrədəimli fırlanma spektrlərinin modelləşdirilməsinin yeni metodikası işlənilib və sınaqdan keçirilmişdir.

8. İlk dəfə olaraq sərbəst molekullarda konformasiya çevrilmələrinin selektiv stimullaşdırılması metodikası təklif olunmuşdur. Sərbəst molekulların konformasiya keçidlərinin İQ-MD (İnfraqırmızı-Mikrodalğa) kvant rezonanslarının köməyi ilə selektiv stimulyasiya metodu işlənmişdir. Bu metod nəinki tədqiq olunan molekulların bütün spektral xətlərinin intensivliklərini artırmağa imkan verir, o həm də bu cür birləşmələrin bir sıra fiziki-kimyəvi xassələrinin mümkün manipulyasiya imkanları üçün geniş perspektivlər açır. Qeteroizomer molekulların konformasiya xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi prosesində mikrodalğalı qaz spektroskopiyaya üsullarından istifadə olunma imkanları araşdırılmışdır. Aşağı stabilliyə malik izomer strukturların tədqiq edilmələrinin effektivliyini yüksəltmək üçün ikiqat kvant rezonanslarının (RD-MD, İQ-MD, MD-MD) tətbiq edilmə variantları araşdırılmışdır. Konformasiya çevrilmələrinin selektiv stimullaşdırılması və bəzi konformasiyalarının spektral xətlərinin intensivliklərinin istiqamətləndirilmiş korreksiyası məqsədi ilə İQ diapazonda nəzərdə tutulan kəmərlərin doldurulma (pompa) şüalanmasından istifadə edilmənin perspektivləri əsaslandırılıb. Karbohidrogen əvəzləməli heteroizomer molekullarda koherent lazer spektroskopiyaya üsulları ilə məcburi konformasiya keçidlərinin həyata keçirilmə imkanları və onların elektromagnit şüalanmasının mikrodalğa diapazonunda qeyd edilmə metodikası maddənin quruluşunun molekulyar və submolekulyar səviyyələrdə tədqiq edilməsi prosesində geniş perspektivlər açır. Bu, məcburi şüalanmanın diapazonlarını mühüm genişlənməsi daxil olaraq, köklənə bilən lazer sistemlərinin keyfiyyəti inkişafı ilə stimullaşdırılır və konformasiya çevrilmələrinin həyata keçirildiyi obyektlərin nomenklaturasını artırır. Bu istiqamətdə aparılan eksperimental tədqiqatların gözlənilən nəticələrinin sırasında seçilmiş molekulun izomer formasının bütöv MD spektrinə düşən udulma xətlərinin intensivliklərinin stimullaşdırılmış dəyişdirməsinə imkan yaratmasını, bundan əlavə relaksasiya proseslərinin vacib olan kompensasiya şəraitlərinin təmin edilməsini nəzərə alaraq konformasiya energetik səviyələrinin məskunluqlarının istiqamətləndirilmiş manipulyasiya üsulu ilə tədqiq olunan birləşməsinin bəzi fiziki və kimyəvi xassələrinin istiqamətləndirilmiş korreksiyasının həyata keçirilmə perspektivlərini də qeyd etmək lazımdır.

9. İlk dəfə olaraq karbohidrogen əvəzləməli molekulların ehtimal olunan struktur parametrlərinin hesablanması üçün aprobasiya metodu işlənmişdir. Bu üsul tədqiq olunan molekulların müxtəlif konformasiyalarının struktur parametrləri haqda maksimal dəqiq məlumat əldə etməyə imkan verir. İzobutil

spirti molekulunun $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{OH}$ mümkün dörd ən stabil konformasiyasının ehtimal olunan struktur parametrləri hesablanmışdır. Molekulun adaptiv strukturu əldə edilməsi əsas prinsipləri izah edilmişdir. Hər bir konformasiya üçün atomlararası məsafələrin, valent bucaqlarının və fırlanma sabitlərinin qiymətləri hesablanmışdır.

10. $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans konformerinin mikrodalğa spektrində 25900-78060 MHz tezliklər diapazonunda “qadağan olunmuş” keçidlərin axtarışları aparılmışdır. Bu molekulun simmetriya müstəvisində dipol momentinin μ_b və μ_c komponentləri yerləşir, dipol momentinin μ_a komponenti isə sıfıra bərabərdir. Bu tip molekularda mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri ilə dipol momentinin molekulun simmetriya müstəvisinə perpendikulyar olan qazanılmış μ_a komponenti yaranır ki, bu da “qadağan olunmuş” keçidlərin meydana gəlməsinə səbəb olur. İlk dəfə olaraq $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans konformerinin mikrodalğa spektrində bu cür “qadağan olunmuş” keçidlər müşahidə olunmuşdur və fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 35$ qiymətləri üçün 70 μ_a -keçidi identifikasiya edilmişdir.

11. Molekulların fırlanma spektrlərində qadağan olunmuş keçidlərin axtarışları və identifikasiyası etanol molekulunun fırlanma spektrində davam etdirilmişdir. Etil spirti molekulunun trans konformerinin fırlanma spektrində bu molekulun dipol momentinin mərkəzəqaçma həyəcanlaşması hesabına qazanılmış olan μ_c komponentinə uyğun olan 72 “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidi identifikasiya edilmişdir ki, bunlardan 28 - keçid millimetrik dalğa uzunluğu diapazonuna, 45 – keçid isə submillimetrik dalğa uzunluğu diapazonuna düşür.

12. $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektrində dipol momentinin rəqs-fırlanma qarşılıqlı təsiri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri nəticəsində qazanılmış μ_a komponenti hesabına meydana çıxan və intensivlikləri mümkün keçidlərin intensivlikləri ilə müqayisədə çox zəif olan “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidləri müşahidə edilmiş və 92 “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidi identifikasiya edilmişdir.

13. $\text{H-CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrində 37.0-78.0 MHz tezliklər diapazonunda “qadağan olunmuş” keçidlərin axtarışları aparılmışdır. Bu molekulun simmetriya müstəvisində dipol momentinin μ_b və μ_a komponentləri yerləşir, dipol momentinin μ_c komponenti isə sıfıra bərabərdir. Bu tip molekularda mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri ilə dipol momentinin molekulun simmetriya müstəvisinə perpendikulyar olan qazanılmış μ_c komponenti yaranır ki, bu da “qadağan olunmuş” keçidlərin meydana gəlməsinə səbəb olur. İlk dəfə olaraq $\text{H-CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrində bu cür “qadağan olunmuş” keçidlər müşahidə olunmuşdur və fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 37$ qiymətləri üçün 64 μ_c -keçidi identifikasiya edilmişdir.

14. İlk dəfə olaraq izopropanol və propanol molekullarının mikrodalğa spektrlərində mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının müqayisəli təhlili aparılmışdır. Bu məqsədlə propil spirti molekulunun fırlanma keçidlərinin identifikasiyası fırlanma kvant ədədi J -nin yüksək qiymətlərinədək davam etdirilmişdir. Əlavə olaraq $J \leq 36$ qiymətləri üçün 61 fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir. Aparılmış müqayisə göstərdi ki, izopropanol molekulunun fırlanma spektrində mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının kifayət dərəcədə nəzərə alınması üçün yalnız kvartik və sekstik həyəcanlaşma əmsallarının nəzərə alınması kifayət etdiyi halda propanol molekulunun fırlanma keçidlərinin hesablanması üçün onuncu tərtibədək mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsallarının nəzərə alınması lazım gəlir. Göstərilmişdir ki, J -nin yüksək qiymətlərinə uyğun fırlanma keçidlərinin identifikasiyası sıxılmış simmetrik fırfırlarda dartılmış simmetrik fırfırlara

nisbətən daha asan olur, bu fakt sözsüz ki, analoji molekullarının mikrodalğa spektrlərinin identifikasiyasında çox əhəmiyyətlidir. Müəyyən edilmişdir ki, J-nin yüksək qiymətlərində fırlanma keçidlərinin identifikasiyası sıxılmış asimmetrik fırfıra tipli molekullada dartılmış asimmetrik fırfıra tipli molekullara nisbətən daha asan olur və nəticə olaraq alınmışdır ki, “qadağan olunmuş” keçidləri sıxılmış asimmetrik fırfıra tipli molekullada dartılmış asimmetrik fırfıra tipli molekullara nisbətən nisbətən asan aşkar etmək olar.

15. Etil spirti - $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun trans -konformerinin fırlanma kvant ədədi J-nin $J \leq 34$ qiymətlərinə uyğun 33 yeni mümkün keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun identifikasiya edilmiş mümkün keçidlərinin fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin fırlanma keçidlərinin təcrübi təyin edilmiş tezlikləri əsasında təyin edilməsi məsələsinin həllinə daxil edilməsi nəticəsində onun fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları böyük dəqiqliklə təyin olunmuşdur, bu parametrlərin təyin olunma xətalı və onlar arasında korrelyasiya əmsalları kifayət qədər azalmışdır. Etil spirti - $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun trans -konformerinin böyük dəqiqliklə təyin olunmuş fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları bir çox məqsədlər üçün istifadə oluna bilərlər, o cümlədən, biratomlu spirt molekullarının struktur parametrlərinin dəqiqləşdirilməsində, hər hansı səbəb üzündən təcrübi olaraq müşahidə oluna bilməyən spektral keçidlərin tezliklərinin qabaqcadan hesablanmasında, molekul daxili potensial funksiyaların təyin edilməsində, molekulun elektrik və relaksasiya xarakteristikalarının müəyyən edilməsində və s. istifadə oluna bilərlər.

16. $\text{H-CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrinin tədqiqi 37.0-78.0 MHz tezliklər diapazonunda davam etdirilmişdir. $J \leq 37$ qiymətləri üçün 78 mümkün fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri kifayət qədər dəqiqləşdirilmişdir. Molekulun dəqiqləşdirilmiş fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri atmosferin və ulduzlararası fəzanın zondlanması zamanı bu molekulun fırlanma tezliklərinin geniş tezliklər diapazonunda və fırlanma kvant ədədi J-nin yüksək qiymətləri üçün böyük dəqiqliklə hesablanmasında istifadə oluna bilərlər.

17. İzopropil spirti - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans-konformerinin mikrodalğa diapazonuna düşən və fırlanma kvant ədədi J-nin $J \leq 40$ qiymətlərinə uyğun 46 yeni mümkün keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun identifikasiya edilmiş mümkün keçidlərinin fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin fırlanma keçidlərinin təcrübi təyin edilmiş tezlikləri əsasında təyin edilməsi məsələsinin həllinə daxil edilməsi nəticəsində onun fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları böyük dəqiqliklə təyin olunmuşdur, bu parametrlərin təyin olunma xətalı və onlar arasında korrelyasiya əmsalları kifayət qədər azalmışdır.

18. $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ molekulunun mikrodalğa diapazonuna düşən və fırlanma kvant ədədinin $J \leq 35$ - qiymətləri daxilində 145 yeni mümkün fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir onun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri kifayət qədər dəqiqləşdirilmişdir.

19. İzobutil spirti molekulunun izomer formaların modelləşdirilməsi aparılıb. İzobutanol molekulunun mikrodalğa fırlanma spektri (18 – 70 QHs diapazonunda) təhlil edilmiş və nəzəri olaraq tədqiq edilmişdir. Bu molekulun dörd izomer formasının adaptə edilmiş bütün struktur parametrləri təyin edilmişdir. Modelləşdirilmənin nəticələri müxtəlif konformasiyalar üçün mikrodalğalı diapazondakı spektral xətlərin siyahısı şəkilində təqdim olunmuşdur.

20. İlk dəfə olaraq molekulların yüksəkayriddimli mikrodalğa spektrləri əsasında onların aşağıayriddimli mikrodalğa spektrlərinin modelləşdirilməsinin additiv metodikası işlənib hazırlanmışdır. Bu metodika Yer atmosferinin müxtəlif qatlarında və kosmik fəzada mövcud olan bir və çoxkomponentli qazfazalı

birleşmələrin monitorinqinin həyata keçirilməsində, həmçinin müxtəlif birleşmələrin molekulyar tərkibinin öyrənilməsində və bu birleşməyə daxil olan molekulyar komponentlərin konsentrasiyalarının müəyyən edilməsində, onların fəzada paylanma xüsusiyyətlərinin aydınlaşdırılması məsələlərində mühüm və perspektivli istiqamət olan məsafədən zondlamanın əsasını təşkil edir.

21. Propanolun daha dayanıqlı iki (trans-trans və trans-qoş) konformerini üçün 0-2 THs tezliklər diapazonunda aşağıayırdeydimli fırlanma spektrləri hesablanmışdır. Hər iki konformerin tarazlıq vəziyyətində statistik çəkiləri nəzərə alınmaqla şüalanmanın maksimum olduğu ehtimal edilən tezliklər diapazonu təyin edilmiş və alınmış nəticələrdən praktiki istifadənin perspektivliyi ilə bağlı tövsiyələr verilmişdir.

22. Ətraf mühitin ekoloji problemlərinin həlli istiqamətində qazfəzal karbonəvzələməli molekulların aşağıayırdeydimli fırlanma spektrlərinin hesablanması üçün işlənmiş yeni metodikası (IV-mərhələdə) konkret molekulyar sistemdə (etanol və deuteriumlu $(CD_3)_2CDOH$ molekullarında yoxlanılmışdır.

23. Fenol molekulunun 10000 MHs -1000000 MHs tezliklər diapazonunda aşağıayırdeydimli fırlanma spektrləri hesablanmışdır. Molekulun şüalanmanın maksimum olduğu ehtimal edilən tezliklər diapazonu təyin edilmiş və alınmış nəticələrdən praktiki istifadənin perspektivliyi ilə bağlı tövsiyələr verilmişdir.

Müasir IQ-MD və MD-MD ikiqat kvant rezonansları təsirlərini əsaslandıran nəzəri riyazi modellər, MD spektroskopiyasının qeteroizomer molekulların ayrı-ayrı konformerlərinin nisbi stabilliklərini müəyyən edən effektiv üsullarından, müasir mikrodalğa spektroskopiyası üsullarından, dəqiq kompyuter proqramlaşdırmasının modelləşdirmə və hesablama əməliyyatlarından istifadə edilmişdir. Molekulyar və spektroskopik parametrlərin ilkin qiymətləri etibarlı, dünya səviyyəli elmi mənbələrdən götürülərək istifadə olunmuşdur.

Alınan nəticələrinin praktiki istifadə perspektivləri barəsində tövsiyələr verilmişdir.

2

Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (faizlə qiymətləndirməli)

(burada doldurmalı)

100%

3

Hesabat dövründə alınmış **elmi nəticələr** (onların yenilik dərəcəsi, elmi və təcrübi əhəmiyyəti, nəticələrin istifadəsi və tətbiqi mümkün olan sahələr aydın şəkildə göstərilməlidir)

(burada doldurmalı)

Molekulların yüksəkayırdeydimli mikrodalğa spektrləri əsasında onların aşağıayırdeydimli mikrodalğa spektrlərinin modelləşdirilməsinin additiv metodikasından atmosferin və kosmosun məsafədən zondlanması, kainatın tərkibinin öyrənilməsində, kosmosda az yaşayan (stabil olmayan) molekulların aşkar edilməsində, həyatın yaranma mexanizminin tədqiqində, ətraf mühitin ekoloji problemlərinin həllində və s. istifadə oluna bilər.

Sərbəst molekullarda konformasiya çevrilmələri elmi spektroskopik tədqiqatlarda, molekulyar sistemlərdə, kimya sənayesində, farmakologiyada, müvafiq maddələrin müəyyən fiziki və kimyəvi xassələrinin korrekt edilməsində (sıxlıq, islanma, elektrik xüsusiyyətlərinin və s.) istifadə oluna bilər.

Molekulun dəqiqləşdirilmiş fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri atmosferin və ulduzlararası fəzanın zondlanması zamanı bu molekulun fırlanma tezliklərinin geniş tezliklər diapazonunda və fırlanma kvant ədədi J-nin yüksək qiymətləri üçün böyük dəqiqliklə hesablanması istifadə oluna bilər.

Struktur parametrlərinin hesablanması üçün aprobeasiya metodundan strukturu məlum olmayan molekulların quruluşlarının tədqiqində istifadə oluna bilər.

4 Layihə üzrə elmi nəşrlər (elmi jurnallarda məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materiallarında məqalələr, tezislər) (dərc olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə, uyğun məlumat - jurnalın adı, nömrəsi, cildi, səhifələri, nəşriyyat, indeksi, İmpact Factor, həmmüəlliflər və s. bunun kimi məlumatlar - ciddi şəkildə dəqiq olaraq göstərməlidir) (surətlərini kağız üzərində və CD şəklinə əlavə etməli!)

(burada doldurulmalı)

1. Исмаилзаде Г.И.*, Мовсумов И. З., Мензелеев М. Р., Казымова С.Б. “Селективное стимулирование конформационных превращений в свободных молекулах.” ЖПС, 2014, т.81, № 5, с.679-682.
2. I.Ismailzadeh, I.Z.Movsumov, M.R.Menzeleyev, A.S.Qasanova, S.B.Kazimova. Theoretical models of the isobutanol molecule conformations microwave spectra. “Azerbaijan Journal of Physics” FİZİKA, Seriya: En, vol. XX, № 1, pp.31-51, 2014
3. Н.А. Борисевич, Г.И. Исмаилзаде, Ч.О.Каджар, С.Б. Казымова, А.С.Гасанова, М.Р.Мензелеев, В.А.Поведайло. “ Моделирование вращательных спектров низкого разрешения газофазных молекул полнотантов атмосферы”. Тезисы докладов 1-ой Азербайджано-Белорусской международной конференции. 21-22 октября 2014, Баку, с.15-17.
4. Н.А. Борисевич, А.Блохин, Г.И. Исмаилзаде, С.Б. Казымова, В.А.Поведайло, Д.Яковлев. «Спектроскопия молекул , охлажденных в сверхзвуковой струе для атмосферной экологии». Тезисы докладов 1-ой Азербайджано-Белорусской международной конференции. 21-22 октября 2014, Баку, с.32-33.
5. Казымова С. Б. Запрещенные переходы в микроволновом спектре транс-конформера молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$. ЖПС, март-апрель 2015, т.82, № 2, с.305-308
6. Kazimova S.B. Forbidden transitions in the microwave spectrum of the trans- conformer of the molecule $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$. *Journal of Applied Spectroscopy* DOI: 10.1007/s10812-015-0101-4, Springer, 2015
7. Каджар Ч.О., Казымова С. Б. «Сравнительный анализ центробежного возмущения во вращательных спектрах молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$.» ЖПС, 2015, т.82, № 3, с.451-454
8. Каджар Ч.О., Исмаилзаде Г.И.*, Мензелеев М. Р., Мовсумов И. З., Казымова С. Б. «К вопросу о моделировании МВ спектров низкого разрешения газофазных молекул: н-пропанол» ЖПС, 2015, т. 82, № 4, (с. 464-472)
9. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелеев М.Р., Джафаров Дж.А. «Оптимизация расчета параметров вероятной структуры газофазных молекул». Сборник материалов Международной научной конференции «Наука современности – 2015» Россия, г.Москва, 29-30 января 2015 г. с.19-22.
10. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелеев М.Р., Джафаров Дж.А. «Микроволновый вращательный спектр молекулы изобутанола и особенности ее пространственного строения» Сборник материалов Международной научной конференции «Наука современности – 2015» Россия, г.Москва, 29-30 января 2015 г. с.15-18.
11. Исмаилзаде Г.И., Каджар Ч.О., Казымова С.Б., Гасанова А.С., Мензелеев М.Р., Джафаров Дж.А. «Стимулирование конформационных переходов в гетероизомерных молекулах». Сборник материалов Международной научной конференции «Наука современности – 2015» Россия, г.Москва, 29-30 января 2015 г. с.11-14.
12. Каджар Ч.О., Казымова С. Б. Центробежное возмущение в микроволновом вращательном

- спектре Tt – конформера молекулы n-пропанола $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$. ЖПС, 2015, т.82, № 5, с.....
13. Кязимова С. Б. Запрещенные переходы в микроволновом спектре транс-конформера молекулы n-пропанола $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$. ЖПС, март-апрель 2015, т.82, № 2, (çapdadır)
14. 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. FIZIKA, 2014, section: Az, vol. XX, N 4, s. 24-26.
15. Qajar Ch., Kazimova S.B. Comparative Centrifugal Distortion Analysis in Rotational Spectra of Propanol and Isopropanol Molecules. *Journal of Applied Spectroscopy* 2015, Volume 82, Issue 3, Page 460-464
16. Adilov A.A., Qajar Ch.O., Mammadov F.H., Qasanova A.S. The Rotational Spectrum of Gauche-Isopropyl Alcohol $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$. Xəbər, Seriya: En (çapdadır)
17. Каджар Ч.О., Исмаилзаде Г.И., Мензелев М. Р. Теоретические модели микроволновых (МВ) вращательных спектров низкого разрешения (НР) этан- и пропантиола. (çara göndərilib)

5 İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər

(burada doldurulmalı)

Karbohidrogen əvəzedicili molekulların ehtimal olunan struktur parametrlərinin hesablanması üçün aprobasiya metodu əsasında molekulların adaptə edilmiş struktur parametrlərinin hesablanması proqramı işlənilib hazırlanmışdır.

Molekulların aşağıyırdeyimli fırlanma spektrlərinin riyazi modulyasiya olunması üçün proqram tərtib olunmuşdur.

Sərbəst molekulların konformasiya keçidlərinin selektiv stimulyasiya metodunun sxemi işlənməmişdir. Molekulların fırlanma spektrlərində "qadqğan olunmuş" keçidlərin hesablanması proqramı tərtib olunmuşdur.

6 Layihə üzrə ezamiyyətlər (ezamiyyə baş tutmuş təşkilatın adı, şəhər və ölkə, ezamiyyə tarixləri, həmçinin ezamiyyə vaxtı baş tutmuş müzakirələr, görüşlər, seminarlarda çıxışlar və s. dəqiq göstərilməlidir)

(burada doldurulmalı)

7 Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (əgər varsa)

(burada doldurulmalı)

8 Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak

(burada doldurulmalı)

9 Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminar, dəyirni masa, konfrans, qurultay, simpozium və s. çıxışlar) (məlumat tam şəkildə göstərilməlidir: a) məruzənin növü: plenar, dəvətli, şifahi və ya divar məruzəsi; b) tədbirin kateqoriyası: ölkədaxili, regional, beynəlxalq)

(burada doldurulmalı)

1-ci Azərbaycan-Belorusiya Beynəlxalq Elmi konfransında (Azərbaycan, Bakı şəh., 21-22 oktyabr 2014- cü il) 2 və

«Наука современности – 2015» Beynəlxalq Elmi konfransında (Rusiya, Moskva şəh., 29-30 yanvar 2015 –ci il) 3 məruzə olunub.

10 Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar, komplektləşdirmə məmullatları
(burada doldurmalı)

11 Yerli həmkarlarla əlaqələr
(burada doldurmalı)
Milli Aviasiya Akademiyası, Azərbaycan Hava Yolları Qapalı Səhmdar Cəmiyyətinin "AZAL-OİL" şirkəti

12 Xarici həmkarlarla əlaqələr
(burada doldurmalı)
"Институт Спектроскопии"(RFR-Moskva), Belarus Respublikası, Minsk şəhəri, BMEA-nın B.İ.Stepanov adına Fizika İnstitutu

13 Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (əgər varsa)
(burada doldurmalı)
İki fizika üzrə elmlər doktoru, bir fəlsəfə üzrə

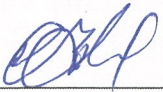
14 Sərgilərdə iştirak (əgər baş tutubsa)
(burada doldurmalı)

15 Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (əgər baş tutubsa)
(burada doldurmalı)

16 Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. (məlumatı tam şəkildə göstərilməlidir)
(burada doldurmalı)

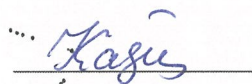
SİFARIŞÇI:
Elmin İnkişafı Fondu

Müşavir
Babayeva Ədilə Əli qızı



İCRAÇI:

Layihə rəhbəri
Kazımova Səkinə Bəhmən qızı



(imza)

"09" 09 2015-cü il

(imza)

"9" sentyabr 2015-cü il

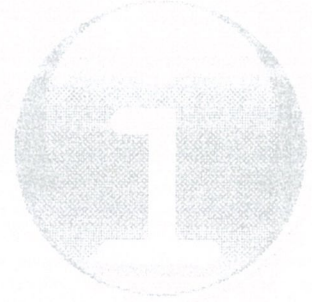
Baş məsləhətçi

Daşdəmirova Xanım Faiq qızı



(imza)

"08" 09 2015-cü il





AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondu ilə
Belarus Respublika Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
birgə elmi-tədqiqat layihələrinin və proqramlarının
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə qrantların verilməsi üzrə
1-ci Azərbaycan-Belarus beynəlxalq müsabiqəsinin
(EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013) qalibi olmuş layihənin
yerinə yetirilməsi üzrə

ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN ƏMƏLİ (TƏCRÜBİ) HƏYATA KEÇİRİLMƏSİ
VƏ LAYİHƏNİN NƏTİCƏLƏRİNDƏN GƏLƏCƏK TƏDQIQATLARD
İSTİFADƏ PERSPEKTİVLƏRİ HAQQINDA
MƏLUMAT VƏRƏQİ
(Qaydalar üzrə Əlavə 16)

Layihənin adı: Atmosferin ekologiyası və astrofizika üçün maraq kəsb edən çoxatomlu molekulların fırlanma spektroskopiyası metodlarının inkişafı

Qrantın məbləği: 80 000 manat

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Kazımova Səkinə Bəhmən qızı

Layihənin nömrəsi: EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/04/1-M-02

Müqavilənin imzalanma tarixi: 14.08.2013

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: 24 ay

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): 01.09.2013 - 01.09.2015

1. Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi

1	Layihənin əsas əməli (təcrübi) nəticələri, bu nəticələrin məlum analoqlar ilə müqayisəli xarakteristikası (burada doldurmalı) 1. İzobutanol molekulunun spektral udma xətlərinin kataloqu (18-70 QHs diapazonunda) tərtib edilmişdir. 2. Müasir mikrodalğa fırlanma spektroskopiya üsullarının və riyazi kompyuter modelləşdirici
----------	--

proqramlarının tətbiqi həyata keçirilmişdir.

3. Karbohidrogen əvəzedicilərin qeteroizomer molekullarının ayrı-ayrı konformerlərinin mikrodalğa fırlanma spektrlərinin, konformasion enerji səviyyələrinin statistik çəkirlərinin məqsədyönlü dəyişməsinə əsaslanan identifikasiyası üsulunun nəzəri əsasları işlənmiş, bu üsulun tətbiqinin konkret mexanizmi təklif edilmişdir.
4. Qeteroizomer molekulların konformasion enerji səviyyələrinin anlayışı irəli sürülmüş, ayrı-ayrı stabil konformerlərin konformasion enerji səviyyələrinin arasında olan enerji fərqinin elektromagnit dalğaların infraqırmızı diapazonunda yerləşməsi müəyyən edilmiş, bunun əsasında İQ-MD ikiqat kvant rezonansları üsulunun tətbiqi yolu ilə istənilən izomerin mikrodalğa fırlanma spektrinə daxil olan bütün udma xəttlərinin intensivliklərinin dəyişməsinin mümkünlüyü əsaslaşdırılmışdır.
5. İzobutanol molekulunda zəif C-H...OH tipli molekul daxili hidrogen əlagəsinin mövcudluğu aşkar edilib və onun molekulun daxili fırlanma potensialına təsiri tədqiq olunub və təsdiqlənmişdir.
6. İzobutanol molekulunda C-H...O-H tipli molekul daxili hidrogen əlagəsi ilə stabilləşdirilən fırlanma izomerinin mikrodalğa spektri aşkar edilərək tədqiq edilib. İzomerin həndəsi quruluşu, statistik çəkisi və müvafiq elektrik xassələri müəyyən edilmişdir.
7. Ətraf mühitin ekolojiyasına ziyan vuran maddələrin ən kiçik kütlələri tərəfindən yaradılan və aşkar edilə bilən molekulyar aşağıayrddimli fırlanma spektrlərinin modelləşdirilməsinin yeni metodikası işlənilib və sınaqdan keçirilmişdir.
8. İlk dəfə olaraq sərbəst molekullarda konformasiya çevrilmələrinin selektiv stimullaşdırılması metodikası təklif olunmuşdur. Sərbəst molekulların konformasiya keçidlərinin İQ-MD (İnfraqırmızı-Mikrodalğa) kvant rezonanslarının köməyi ilə selektiv stimulyasiya metodu işlənmişdir. Bu metod nəinki tədqiq olunan molekulların bütün spektral xətlərinin intensivliklərini artırmağa imkan verir, o həm də bu cür birləşmələrin bir sıra fiziki-kimyəvi xassələrinin mümkün manipulyasiya imkanları üçün geniş perspektivlər açır. Geteroizomer molekulların konformasiya xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi prosesində mikrodalğalı qaz spektroskopiyaya üsullarından istifadə olunma imkanları araşdırılmışdır. Aşağı stabilliyə malik izomer strukturların tədqiq edilmələrinin effektivliyini yüksəltmək üçün ikiqat kvant rezonanslarının (RD-MD, İQ-MD, MD-MD) tətbiq edilmə variantları araşdırılmışdır. Konformasiya çevrilmələrinin selektiv stimullaşdırılması və bəzi konformasiyalarının spektral xətlərinin intensivliklərinin istiqamətləndirilmiş korreksiyası məqsədi ilə İQ diapazonda nəzərdə tutulan kiçik doldurulma (pompalama) şüalanmasından istifadə edilmənin perspektivləri əsaslandırılıb. Karbohidrogen əvəzləməli heteroizomer molekullarda koherent lazer spektroskopiyaya üsulları ilə məcburi konformasiya keçidlərinin həyata keçirilmə imkanları və onların elektromagnit şüalanmasının mikrodalğa diapazonunda qeyd edilmə metodikası maddənin quruluşunun molekulyar və submolekulyar səviyyələrdə tədqiq edilməsi prosesində geniş perspektivlər açır. Bu, məcburi şüalarının diapazonlarını mühüm genişlənməsi daxil olaraq, köklənə bilən lazer sistemlərinin keyfiyyəti inkişafı ilə stimullaşdırılır və konformasiya çevrilmələrinin həyata keçirildiyi obyektlərin nomenklaturasını artırır. Bu istiqamətdə aparılan eksperimental tədqiqatların gözlənilən nəticələrinin sırasında seçilmiş molekulun izomer formasının bütöv MD spektrinə düşən udulma xətlərinin intensivliklərinin stimullaşdırılmış dəyişdirməsinə imkan yaratmasını, bundan əlavə relaksasiya proseslərinin vacib olan kompensasiya şəraitlərinin təmin edilməsini nəzərə alaraq konformasiya enerjetik səviyyələrinin məskunluqlarının istiqamətləndirilmiş manipulyasiya üsulu ilə tədqiq olunan birləşməsinin bəzi fiziki və kimyəvi xassələrinin istiqamətləndirilmiş korreksiyasının həyata keçirilmə perspektivlərini də qeyd etmək lazımdır.

9. İlk dəfə olaraq karbohidrogen əvəzləməli molekulların ehtimal olunan struktur parametrlərinin hesablanması üçün aprobasiya metodu işlənmişdir. Bu üsul tədqiq olunan molekulların müxtəlif konformasiyalarının struktur parametrləri haqda maksimal dəqiq məlumat əldə etməyə imkan verir. İzobutil spirti molekulunun $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{OH}$ mümkün dörd ən stabil konformasiyasının ehtimal olunan struktur parametrləri hesablanmışdır. Molekulun adaptiv strukturu əldə edilməsi əsas prinsipləri izah edilmişdir. Hər bir konformasiya üçün atomlararası məsafələrin, valent bucaqlarının və fırlanma sabitlərinin qiymətləri hesablanmışdır.

10. $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans konformerinin mikrodalğa spektrində 25900-78060 MHz tezliklər diapazonunda “qadağan olunmuş” keçidlərin axtarıları aparılmışdır. Bu molekulun simmetriya müstəvisində dipol momentinin μ_b və μ_c komponentləri yerləşir, dipol momentinin μ_a komponenti isə sıfıra bərabərdir. Bu tip molekullarda mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri ilə dipol momentinin molekulun simmetriya müstəvisinə perpendikulyar olan qazanılmış μ_a komponenti yaranır ki, bu da “qadağan olunmuş” keçidlərin meydana gəlməsinə səbəb olur. İlk dəfə olaraq $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans konformerinin mikrodalğa spektrində bu cür “qadağan olunmuş” keçidlər müşahidə olunmuşdur və fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 35$ qiymətləri üçün 70 μ_a -keçidi identifikasiya edilmişdir.

11. Molekulların fırlanma spektrlərində qadağan olunmuş keçidlərin axtarıları və identifikasiyası etanol molekulunun fırlanma spektrində davam etdirilmişdir. Etil spirti molekulunun trans konformerinin fırlanma spektrində bu molekulun dipol momentinin mərkəzəqaçma həyəcanlaşması hesabına qazanılmış olan μ_c komponentinə uyğun olan 72 “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidi identifikasiya edilmişdir ki, bunlardan 28 - keçid millimetrik dalğa uzunluğu diapazonuna, 45 - keçid isə submillimetrik dalğa uzunluğu diapazonuna düşür.

12. $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ molekulunun trans-konformerinin fırlanma spektrində dipol momentinin rəqs-fırlanma qarşılıqlı təsiri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri nəticəsində qazanılmış μ_a komponenti hesabına meydana çıxan və intensivlikləri mümkün keçidlərin intensivlikləri ilə müqayisədə çox zəif olan “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidləri müşahidə edilmiş və 92 “qadağan olunmuş” mərkəzəqaçma keçidi identifikasiya edilmişdir.

13. $\text{H}-\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrində 37.0-78.0 MHz tezliklər diapazonunda “qadağan olunmuş” keçidlərin axtarıları aparılmışdır. Bu molekulun simmetriya müstəvisində dipol momentinin μ_b və μ_a komponentləri yerləşir, dipol momentinin μ_c komponenti isə sıfıra bərabərdir. Bu tip molekullarda mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının təsiri ilə dipol momentinin molekulun simmetriya müstəvisinə perpendikulyar olan qazanılmış μ_c komponenti yaranır ki, bu da “qadağan olunmuş” keçidlərin meydana gəlməsinə səbəb olur. İlk dəfə olaraq $\text{H}-\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrində bu cür “qadağan olunmuş” keçidlər müşahidə olunmuşdur və fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 37$ qiymətləri üçün 64 μ_c -keçidi identifikasiya edilmişdir.

14. İlk dəfə olaraq izopropanol və propanol molekullarının mikrodalğa spektrlərində mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının müqayisəli təhlili aparılmışdır. Bu məqsədlə propil spirti molekulunun fırlanma keçidlərinin identifikasiyası fırlanma kvant ədədi J –nin yüksək qiymətlərinədək davam etdirilmişdir. Əlavə olaraq $J \leq 36$ qiymətləri üçün 61 fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir. Aparılmış müqayisə göstərdi ki, izopropanol molekulunun fırlanma spektrində mərkəzəqaçma həyəcanlaşmasının kifayət dərəcədə nəzərə alınması üçün yalnız kvartik və sekstik həyəcanlaşma əmsallarının nəzərə alınması kifayət etdiyi halda propanol molekulunun fırlanma keçidlərinin hesablanması üçün onuncu tərtibədək mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsallarının nəzərə alınması lazım gəlir. Göstərilmişdir ki, J –nin yüksək qiymətlərinə uyğun fırlanma keçidlərinin identifikasiyası sıxılmış simmetrik fırfırlarda dartılmış simmetrik fırfırlara nisbətən daha asan olur, bu fakt sözsüz ki, analoji molekullarının mikrodalğa spektrlərinin identifikasiyasında çox əhəmiyyətlidir. Müəyyən edilmişdir ki, J -nin yüksək qiymətlərində fırlanma keçidlərinin identifikasiyası sıxılmış asimmetrik fırfıra tipli molekulada dartılmış asimmetrik fırfıra tipli molekulara nisbətən daha asan olur və nəticə olaraq alınmışdır ki, “qadağan olunmuş” keçidləri sıxılmış asimmetrik fırfıra tipli molekulada dartılmış asimmetrik fırfıra tipli molekulara nisbətən nisbətən asan aşkar etmək olar.

15. Etil spirti - $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun trans –konformerinin fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 34$ qiymətlərinə uyğun 33 yeni mümkün keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun identifikasiya edilmiş mümkün keçidlərinin fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin fırlanma keçidlərinin təcrübi təyin edilmiş tezlikləri əsasında təyin edilməsi məsələsinin həllinə daxil edilməsi nəticəsində onun fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları böyük dəqiqliklə təyin olunmuşdur, bu parametrlərin təyin olunma xətalı və onlar arasında korrelyasiya əmsalları kifayət qədər azalmışdır. Etil spirti - $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun trans –konformerinin böyük dəqiqliklə təyin olunmuş fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları bir çox məqsədlər üçün istifadə oluna bilirlər, o cümlədən, biratomlu spirt molekullarının struktur parametrlərinin dəqiqləşdirilməsində, hər hansı səbəb üzündən təcrübi olaraq müşahidə oluna bilməyən spektral keçidlərin tezliklərinin qabaqcadan hesablanmasında, molekul daxili potensial funksiyaların təyin edilməsində, molekulun elektrik və relaksasiya xarakteristikalarının müəyyən edilməsində və s. istifadə oluna bilirlər.

16. $\text{H-CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ molekulunun Tt-konformerinin mikrodalğa spektrinin tədqiqi 37.0-78.0 MHz tezliklər diapazonunda davam etdirilmişdir. $J \leq 37$ qiymətləri üçün 78 mümkün fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri kifayət qədər dəqiqləşdirilmişdir. Molekulun dəqiqləşdirilmiş fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri atmosferin və ulduzlararası fəzanın zondlanması zamanı bu molekulun fırlanma tezliklərinin geniş tezliklər diapazonunda və fırlanma kvant ədədi J -nin yüksək qiymətləri üçün böyük dəqiqliklə hesablanmasında istifadə oluna bilirlər.

17. İzopropil spirti - $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ molekulunun trans-konformerinin mikrodalğa diapazonuna düşən və fırlanma kvant ədədi J -nin $J \leq 40$ qiymətlərinə uyğun 46 yeni mümkün keçidi identifikasiya edilmişdir. Molekulun identifikasiya edilmiş mümkün keçidlərinin fırlanma və mərkəzəqaçma sabitlərinin fırlanma keçidlərinin təcrübi təyin edilmiş tezlikləri əsasında təyin edilməsi məsələsinin həllinə daxil edilməsi nəticəsində onun fırlanma sabitləri və mərkəzəqaçma həyəcanlaşma əmsalları böyük dəqiqliklə təyin olunmuşdur, bu parametrlərin təyin olunma xətalı və onlar arasında korrelyasiya əmsalları kifayət qədər azalmışdır.

18. $(\text{CD}_3)_2\text{CDOH}$ molekulunun mikrodalğa diapazonuna düşən və fırlanma kvant ədədinin $J \leq 35$ - qiymətləri daxilində 145 yeni mümkün fırlanma keçidi identifikasiya edilmişdir onun fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri kifayət qədər dəqiqləşdirilmişdir.

19. İzobutil spirti molekulunun izomer formaların modelləşdirilməsi aparılıb. İzobutanol molekulunun mikrodalğa fırlanma spektri (18 – 70 QHs diapazonunda) təhlil edilmiş və nəzəri olaraq tədqiq edilmişdir. Bu molekulun dörd izomer formasının adaptə edilmiş bütün struktur parametrləri təyin edilmişdir. Modelləşdirilmənin nəticələri muxtəlif konformasiyalar üçün mikrodalğalı diapazondakı spektral xətlərin siyahısı şəkilində təqdim olunmuşdur.

20. İlk dəfə olaraq molekulların yüksəkayırdeimli mikrodalğa spektrləri əsasında onların aşağıayırdeimli mikrodalğa spektrlərinin modelləşdirilməsinin additiv metodikası işlənib hazırlanmışdır. Bu metodika Yer atmosferinin müxtəlif qatlarında və kosmik fəzada mövcud olan bir və çoxkomponentli qazfazlı birləşmələrin monitorinqinin həyata keçirilməsində, həmçinin müxtəlif birləşmələrin molekulyar tərkibinin öyrənilməsində və bu birləşməyə daxil olan molekulyar komponentlərin konsentrasiyalarının müəyyən edilməsində, onların fəzada paylanma xüsusiyyətlərinin aydınlaşdırılması məsələlərində mühüm və perspektivli istiqamət olan məsafədən zondlamanın əsasını təşkil edir.

21. Propanolun daha dayanıqlı iki (trans-trans və trans-qoş) konformerləri üçün 0-2 THs tezliklər diapazonunda aşağıayırdeimli fırlanma spektrləri hesablanmışdır. Hər iki konformerin tarazlıq vəziyyətində statistik çəkilişi nəzərə alınmaqla şüalanmanın maksimum olduğu ehtimal edilən tezliklər diapazonu təyin edilmiş və alınmış nəticələrdən praktiki istifadənin perspektivliyi ilə bağlı tövsiyələr verilmişdir.

22. Ətraf mühitin ekoloji problemlərinin həlli istiqamətində qazfazlı karbonəvəzləməli molekulların aşağıayırdeimli fırlanma spektrlərinin hesablanması işlənmiş yeni metodikası konkret molekulyar sistemdə (etanol və deuteriumlu $(CD_3)_2CDOH$ molekullarında) yoxlanılmışdır.

23. Fenol molekulunun 10000 MHs -1000000 MHs tezliklər diapazonunda aşağıayırdeimli fırlanma spektrləri hesablanmışdır. Molekulun şüalanmanın maksimum olduğu ehtimal edilən tezliklər diapazonu təyin edilmiş və alınmış nəticələrdən praktiki istifadənin perspektivliyi ilə bağlı tövsiyələr verilmişdir.

2 Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi haqqında məlumat (istehsalatda tətbiq (tətbiqin aktını əlavə etməli); tədris və təhsildə (nəşr olunmuş elmi əsərlər və s. – təhsil sistemində tətbiqin aktını əlavə etməli); bağlanmış xarici müqavilələr və ya beynəlxalq layihələr (kimlə bağlanıb, müqavilənin və ya layihənin nömrəsi, adı, tarixi və dəyəri); dövlət proqramlarında (dövlət orqanının adı, qərarın nömrəsi və tarixi); ixtira üçün alınmış patentlərdə (patentin nömrəsi, verilmə tarixi, ixtiranın adı); və digərlərində)

(burada doldurmalı)

Alınan nəticələrinin praktik istifadə perspektivləri barəsində tövsiyələr verilmişdir.

2. Layihənin nəticələrindən gələcək tədqiqatlarda istifadə perspektivləri

1 Nəticələrin istifadəsi perspektivləri (fundamental, tətbiqi və axtarış-innovasiya yönlü elmi-tədqiqat layihə və proqramlarında; dövlət proqramlarında; dövlət qurumlarının sahə tədqiqat proqramlarında; ixtira və patent üçün verilmiş ərizələrdə; beynəlxalq layihələrdə; və digərlərində)

(burada doldurmalı)

Molekulların yüksəkayırdedimli mikrodalğa spektrləri əsasında onların aşağıayırdedimli mikrodalğa spektrlərinin modelləşdirilməsinin additiv metodikasından atmosferin və kosmosun məsafədən zondlanmasında, kainatın tərkibinin öyrənilməsində, kosmosda az yaşayan(stabil olmayan) molekulların aşkar edilməsində, həyatın yaranma mexanizminin tədqiqində, ətraf mühitin ekoloji problemlərinin həllində və s. istifadə oluna bilər.

Sərbəst molekullarda konformasiya çevrilmələri elmi spektroskopik tədqiqatlarda, molekulyar sistemlərdə, kimya sənayesində, farmakologiyada, müvafiq maddələrin müəyyən fiziki və kimyəvi xassələrinin korrektə edilməsində(sıxlığın, islanma, elektrik xüsusiyyətlərinin və s.)istifadə oluna bilər.

Molekulun dəqiqləşdirilmiş fırlanma və mərkəzəqaçma sabitləri atmosferin və ulduzlararası fəzanın zondlanması zamanı bu molekulun fırlanma tezliklərinin geniş tezliklər diapazonunda və fırlanma kvant ədədi J-nin yüksək qiymətləri üçün böyük dəqiqliklə hesablanmasında istifadə oluna bilərlər.

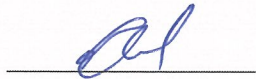
Struktur parametrlərinin hesablanması üçün aprobaşiyə metodundan strukturu məlum olmayan molekulların quruluşlarının tədqiqində istifadə oluna bilər.

SİFARİŞÇİ:

Elmin İnkişafı Fondu

Müşavir

Babayeva Ədilə Əli qızı



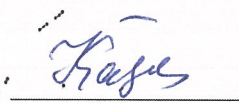
(imza)

"09" 09 2015-cü il

İCRAÇI:

Layihə rəhbəri

Kazımova Səkinə Bəhmən qızı



(imza)

"9" sentyabr 2015-cü il

Baş məsləhətçi

Daşdəmirova Xanım Faiq qızı



(imza)

"09" 09 2015-cü il



**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU**

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondu ilə
Belarus Respublika Fundamental Tədqiqatlar Fondunun
birgə elmi-tədqiqat layihələrinin və proqramlarının
maliyyələşdirilməsi məqsədi ilə grantların verilməsi üzrə
1-ci Azərbaycan-Belarus beynəlxalq müsabiqəsinin
(EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013) qalibi olmuş layihənin
yerinə yetirilməsi üzrə

ALINMIŞ ELMİ MƏHSUL HAQQINDA MƏLUMAT
(Qaydalar üzrə Əlavə 17)

Layihənin adı: **Atmosferin ekologiyası və astrofizika üçün maraq kəsb edən çoxatomlu molekulların fırlanma spektroskopiyası metodlarının inkişafı**

Qrantın məbləği: 80 000 manat

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Kazımova Səkinə Bəhmən qızı**

Layihənin nömrəsi: **EIF-BGM-2-BRFTF-1-2013-07/04/1-M-02**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **14.08.2013**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **24 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01.09.2013 - 01.09.2015**

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

1. Elmi əsərlər (sayı)

No	Tamliq dərəcəsi	Dərc olunmuş	Çapa qəbul olunmuş və ya çapda olan	Çapa göndərilmiş
1.	Elmi məhsulun növü Monoqrafiyalar			
	həmçinin, xaricdə çap olunmuş			
2.	Məqalələr	12	11	1

	həmçinin xarici nəşrlərdə			
3.	Konfrans materiallarında məqalələr	5		
	O cümlədən, beynəlxalq konfrans materiallarında	5		
4.	Məruzələrin tezisləri			
	həmçinin, beynəlxalq tədbirlərin toplusunda			
5.	Digər (icmal, atlas, kataloq və s.)			

2. İxtira və patentlər (sayı)

Nö	Elmi məhsulun növü	Alınmış	Verilmiş	Ərizəsi verilmiş
1.	Patent, patent almaq üçün ərizə			
2.	İxtira			
3.	Səmərələşdirici təklif			

3. Elmi tədbirlərdə məruzələr (sayı)

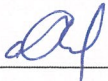
Nö	Tədbirin adı (seminar, dəyirmi masa, konfrans, qurultay, simpozium və s.)	Tədbirin kateqoriyası (ölkədaxili, regional, beynəlxalq)	Məruzənin növü (plenary, dəvətli, şifahi, divar)	Sayı
1.				
2.				
3.				

SİFARIŞÇI:

Elmin İnkişafı Fondu

Müşavir

Babayeva Ədilə Əli qızı



İCRAÇI:

Layihə rəhbəri

Kazımova Səkinə Bəhmən qızı



(imza)

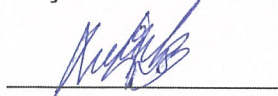
"09" 09 2015-cü il

(imza)

"9" sentyabr 2015-cü il

Baş məsləhətçi

Daşdəmirova Xanım Faiq qızı



(imza)

"08" 08 2016-cü il

