АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ФЕРРОЦЕНА И НЕКОТОРЫХ ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО РАСЧЁТА

О.Ш. Абдуллоев, И.Р. Аскаров, Ш.Х. Абдуллаев

Gaussian 09 дастурий пакетини қўллаган ҳолда квант-кимёвий ҳисоблаш асосида ферроцен, 1,1`-диацетилферроцен ва 1,1'-диметилферроценларнинг тебраниш спектрлари таҳлил қилинди. Ферроцен ва унинг ҳосилалари қиёсий таҳлили функционал зичлик назарияси гибрид DFT/B3LYP методининг махсус ONIOM дастурида Fe атомлари учун cc-pvdz, C, H ва O атомлари учун 6-311G(d) базисларини қўллаган ҳолда ҳисоблаш натижалари экспериментал спектрларга энг яқин эканлиги қайд этилди. Ҳисобланган қийматларнинг тажриба натижаларидан бир оз фарқини тўғрилаш мақсадида алоҳида типдаги тебранишлар учун масштабловчи коэффициентларнинг ўртача қиймати киритилди.

Калит сўзлар: *ферроцен, 1,1`-диацетилферроцен, 1,1'-диметилферроцен, ИҚ-спектр, квант-кимёвий ҳисоблаш, DFT/B3LYP ONIOM методи, масштабловчи коэффициент.*

Проведен анализ колебательных спектров ферроцена, 1,1`-диацетилферроцена и диметилферроцена на основе квантово-химических расчетов с использованием программного пакета Gaussian 09. Сопоставительный анализ спектров ферроцена и его производных показал, что наиболее близкими экспериментальным спектрам результатами являются вычисленные данные с использованием специальной программы ONIOM гибридного метода теории функционала плотности DFT/B3LYP с базисами cc-pvdz для атома Fe и 6-311G(d) и атомов C, H,

О. Для устранения небольших различий расчётных значений волновых чисел введены усредненные значения масштабирующих коэффициентов для отдельных типов колебаний.

Кючевые слова: *ферроцен, 1,1`-диацетилферроцен, 1,1'-диметилферроцен, ИК-спектр, квантово-химический расчет, метод DFT/B3LYP ONIOM, масштабирующий коэффициент.*

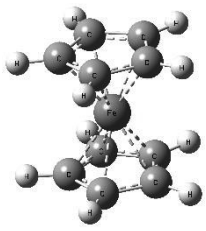
The article analyses the vibrational spectra of ferrocene, 1,1'-diacetylferrocene and dimethyl ferrocene were analyzed on the basis of quantum chemical calculations with the use of the Gaussian 09 software package. A comparative analysis of the spectra of ferrocene and its derivatives showed that the calculated results obtained by using ONIOM's special program of the hybrid method of the density functional theory DFT / B3LYP with cc-pvdz bases for Fe and 6-311G (d) for C, H, and O atoms.To eliminate small differences in the calculated values of wave numbers, we have introduced averaged values of the scaling factors for individual types of oscillations.in the calculated values of the wave numbers provisions the band maxima of the experimental data, put the average values of refinable coefficients for individual types of vibrations.

Key words: *ferrocene, 1,1`-diacetylferrocene, 1,1-dimethylferrocene, IR-specter, quantum chemical calculation, method DFT/B3LYP ONIOM, refinable coefficient.*

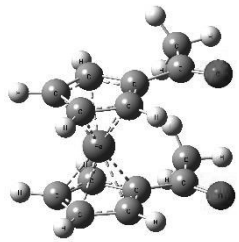
В настоящее время разработано множество специальных компьютерных программ, таких, как Gaussian, HyperChem, MOPAC и мн. др., позволяющих выполнять квантово-химические расчеты в исследовании электронного строения и реакционной способности молекул. Такие расчёты имеют важное теоретическое и практическое значение в предварительной оценке направления реакций, при анализе экспериментально полученных данных и идентификации новых синтезированных соединений.

В настоящей статье приведены результаты анализа колебательных спектров ферроцена и некоторых его производных на основании квантово-химических расчётов путем сопоставления теоретических и экспериментально полученных данных. Ферроцен, синтезированный сравнительно давно [1,2], и свойства многочисленных его производных подробно изучены [3]. Будучи устойчивыми железосодержащими π-комплексами, проявляющими небензоидную ароматическую природу, в их теоретически полученных спектрах обнаруживается некоторый набор аномальных физико-химических параметров. Имеются своеобразные различия при теоретическом изучении структуры производных ферроцена в отношении данных, полученных физическими методами исследования. В частности, при теоретическом определении положения полос поглощений расчетными методами, соответствующих скелетным колебаниям, в их колебательных спектрах возникают некоторые несоответствия с экспериментальными спектрами. Причина этого кроется в некотором сдвиге полос валентных колебаний С-Н связи при внесении других заместителей в циклопентадиенильное (Ср) кольцо, а также в близости частот валентных колебаний С-Н связей другого рода. Повышение точности соответствия теоретических и экспериментальных результатов достигается применением так называемого способа “масштабирующего умножителя” [4].

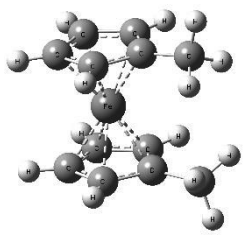
Ниже излагаются результаты исследований по анализу ИК-спектров ферроцена (**1**), 1,1`-диацетилферроцена (**2**) и диметилферроцена (**3**) на основе квантово-химических расчетов с последующим определением для них масштабирующих умножителей. Квантово-химические расчеты осуществлены с использованием программного пакета Gaussian 09 [5].



1



2



3

В таблице 1 приведены теоретически вычисленные и экспериментально измеренные ИК-спектроскопические результаты для соединений **1**, **2** и **3**.

Методы расчета

Ранее нами [6,7] было установлено, что для квантово-химических вычислений координат молекулярной структуры и некоторых физико-химических характеристик ферроцена наиболее оптимальным является гибридный метод теории функционала плотности DFT/B3LYP (Becke, Lee, Yang, Parr) [4,8]. Известно также, что при проведении квантово-химических расчётов молекул, содержащих атомы различных периодов и электронным строением, можно руководствоваться специальными методами [4, 9, 10].

В данной работе квантово-химический расчёт колебательных спектров ферроцена и его производных был проведен по 13 схемам программы ONIOM. Анализ полученных результатов показывает, что для расчёта колебательных спектров ферроцена и его производных можно применять 6 из этих вычислительных подходов, позволивших приблизить расчётный спектр к экспериментальному с погрешностью менее 5 %.

Обсуждение полученных результатов

Колебательные спектры ферроцена и его некоторых производных экспериментально изучены в работах [11-22]. В молекуле ферроцена, в основном, обнаруживаются 9 видов колебаний (вращательное колебание, δ_{CpMCp},υ_{M-L}, χ_{CCC}, ρ_{CH}, γ_{CCC}, β_{CH}, υ_{CC} и υ_{CH}).

Проведенные нами квантово-химические расчёты показали, что полосы поглощения в области 170–180 см$^{-1}$ в спектре ферроцена относятся к деформационным колебаниям связи Ср-Fe-Ср (δ_{CpFeCp}), полосы поглощений в диапазоне 300–500 см$^{-1}$ соответствуют валентным колебаниям связей между Ср-кольца и атома Fe (ν_{M-L}) (Табл. 1).

Маятниковые колебания связей С–Н, происходящие вне плоскости кольца (ρ_{CH}), проявляются в области 800-850 и 1050-1060 см$^{-1}$, а аналогичные плоскостные колебания (β_{CH}) дают пики в диапазоне 1000-1180 см$^{-1}$. Валентные колебания С–Н связей Ср кольца (υ_{CH}) обнаруживаются в виде сильно интенсивных полос поглощений в области 3075-3110 см$^{-1}$.

Полосы поглощения, относящиеся к валентным колебаниям связей между атомами углеродов кольца (υ_{CC}), наблюдаются около 1410 см$^{-1}$. В спектрах производных ферроцена **2** и **3** наблюдается небольшой сдвиг полос поглощений, ответственных за эти колебания. Это обстоятельство можно объяснить положительным или отрицательным индукционными эффектами отдельных заместителей кольца. Поэтому в данной работе выбраны гетероаннулярно дизамещенные производные ферроцена с заместителями, имеющими разнородные индукционные эффекты.

Таблица 1.

*Значения волновых чисел положения максимумов полос, вычисленных теоретически по методу **I** и найденныхэкпериментально в ИК-спектрах молекул соединений **1, 2, 3,** а также их отнесения.*

Соединение **1**			Соединение **2**			Соединение **3**		
Тип колебания	Вычисленный υ, см$^{-1}$	Найденный υ, см$^{-1}$	Тип колебания	Вычисленный υ, см$^{-1}$	Найденны й υ, см$^{-1}$	Тип колебания	Вычисленный υ, см$^{-1}$	Найденный υ, см$^{-1}$
δ_{CpM}	162,78 165,48	170 [a]* 179 [b]						
ν_{M-L}	298,05 354,33 355,12 458,58 482,8 483,09	303 [a] 311 [b] 309 [c] 388 [a] 393 [b] 389 [c] 478 [a] 477 [b] 476 [c] 492 [a] 490 [b] 494 [c]	ν_{M-L}	459,55 479,09 514,37 539,76	483 [d] 487 [e] 503 [d] 503 [e] 543 [d] 542 [e] 596 [d] 596 [e]	ν_{M-L}	462,02 467,33 489,18	488 [h] 482 [i] 477 [k] 488 [i] 503 [i] 495 [k]
			$\delta_{OCC(Me)}$	628,4 629,73	622 [d] 622 [e]			

χ_{CCC}	587,25 589 589,2 590,46	500 [a] 569 500 [a] 600 [b] 597 [c]	$\chi_{CCC(O)}$	673,12 677,11	655 [d] 674 [d]	χ_{CCC}	587,7 589,08 597,03 600,22	604 [h] 604 [i] 618 [k]
						$\nu_{C(Cp)-C(Me)}$	640,5 647,52	634 [h] 634 [i] 631 [k]
ρ_{CH}	836,32 837,55 840,02 851,32 858,88 873,36 913,98 914,54 921,79 922,77	804 [a] 815 [b] 814 [c] 811 [a] 818 [b] 815 [c] 800 [a] 815 [b] 846 [c] 834 [a] 840 [b] 844 [c] 834 [a] 840 [b] 844 [c] 1050 [a] 1062 [b] 1050 [a]	ρ_{CH}	846,45 847,63 880,3 886,33 902,81 916,84 921,67 925,4 930,9 939,2	826 [d] 826 [e] 893 [d] 892 [e] 901[d,e] 912[d,e]	ρ_{CH}	832,53 835,62 874,34 877,67 881,22 900,76 911,4 918,88	808 [h] 811 [i] 818 [k]
γ_{CCC}	859,19 872,92 879 880,99	900 [a] 900 [c] 900 [a] 902 [c]	γ_{CCC}	867,53 868,61	844 [d] 843 [e] 858 [d] 858 [e]	γ_{CCC}	855,56 863,3 947,86 956,32	851 [h] 834 [i] 862 [i] 850 [k] 924 [h] 926 [i] 922 [k]
			$\beta_{C(Me)-H}$	999,86 1001,27 1077,12 1079,82 1413,46 1428	968 [d] 969 [e] 1067 [d] 1067 [e] 1403[d,e]	$\rho_{C(Me)-H}$	1019,04 1022,24 1075,42 1080,67	1001 [h] 1001 [i] 1000 [k]
β_{CH}	1036,87 1037,17 1044,03 1044,26 1101,59 1101,73 1108,88 1109,61	1010 [a] 1001 [b] 1000 [c] 1002 [a] 1006 [b] 1005 [c] 1170 [a] 1058 [c] 1178 [a] 1197 [b] 1058 [c]	β_{CH}	1060,2 1064,53 1083,91 1091,23 1102,05 1109,11 1274,82 1277,64	1021 [d] 1021 [e] 1053 [d] 1053 [e] 1073 [d] 1073 [e] 1109 [d] 1281[d,e]	β_{CH}	1068,32 1074,98 1090,57 1095,4 1103,64 1109,69	1024 [h] 1026 [i] 1024 [k] 1039 [h] 1038 [i] 1038 [k] 1052 [h] 1062 [i] 1106 [h] 1104 [i] 1106 [k]
υ_{CC}	1137,81 1391,81	1108 [a] 1106 [b] 1096 [c] 1108 [a] 1107 [b] 1110 [c] 1560 [a] 1358 [b] 1356 [c] 1560 [a] 1357 [c]	υ_{CC}	1157,07 1157,32 1325,01 1334,44 1380,79 1389,49	1117[d,e] 1343 [d] 1342 [e] 1355 [d] 1364 [e] 1376 [d] 1378 [e]	υ_{CC}	1274,77 1278,17 1385,25 1402,13 1418,97 1430,97	1220 [h] 1228 [i] 1228 [k] 1260 [k]
β_{CH}	1324,7 1325,6	1200 [a] 1257 [a] 1255 [c]				β_{CH}	1298,76 1300,72	1341 [k] 1362 [h] 1362 [i] 1370 [k] 1370 [h] 1368 [i] 1371 [k] 1379 [h]1380 [i] 1383 [k] 1388 [i] 1388 [k] 1412 [k]
υ_{CC}	1408,97 1469,16	1408 [a] 1414 [b] 1410 [c] 1411 [a] 1414 [b] 1411 [c]	υ_{CC}	1442,86 1442,91 1452,94 1455,57	1466 [d] 1467 [e]	υ_{CC}	1464,83 1468,27	1462 [h] 1464 [i] 1458 [k] 1477 [h] 1476 [i] 1475 [k]
						$\rho_{C(Me)-H}$	1522,95 1529,71 1530,59 1549,27	1629 [h] 1638 [i] 1479 [k] 1635 [h] 1643 [h]
						$\upsilon_{C(Cp)-C(Me)}$	1539,82 1541,89	1676 [h] 1647 [i] 1438 [k]
			$\beta_{C(Me)-H}$	1502,54 1511,59	1620 [d] 1619 [e]			

				1513,04 1514,79 1522,67 1526,34 1665,26				
			υ_{CO}	1665,26 1670,62	1663 [d] 1657 [e]			
			$\upsilon_{C(Me)-H}$	3044,59 3045,9 3118,7 3119,5 3169,21 3169,63	3076[d,e] 3091 [d] 3090 [e] 3106 [d] 3105 [e]	$\upsilon_{C(Me)-H}$	3034,22 3035,58 3094,95 3097,48 3120,78 3123,03	2728 [h] 2863 [i] 3073 [k] 2855 [h] 2884 [i] 2924 [h] 2920 [i]
υ_{CH}	3272,21 3273,36 3288,43 3289,24 3305,11 3305,2 3272,72 3273,85 3288,65 3289,44	3085 [a] 3103 [b] 3088 [c] 3100 [a] 3104 [c] 3085 [a] 3089 [b] 3100 [c] 3075 [a] 3098 [b] 3081 [c] 3083 [a] 3098 [b] 3100 [c] 3099 [a] 3112 [b] 3109 [c]	υ_{CH}	3276,22 3277,43 3288,06 3288,96 3300,69 3301,04 3311,06 3311,14	3299 [d,e]	υ_{CH}	3265,19 3266,22 3270,32 3271,04 3279,93 3280,71 3294,96 3295,4	2963 [h] 2946 [i] 3073 [k] 3079 [h] 3079 [i] 3091 [h] 3093 [i] 3123 [h] 3107 [i]

*литература[a]-[11], [b]-[12], [c]-[13,14], [d]-[18], [e]-[19], [h]-[20], [i]-[21], [k]-[17]

При сопоставлении теоретически вычисленных и экпериментально измеренных результатов наблюдается относительно небольшое занижение теоретических значений, отвечающих колебаниям δ_{CpMCp},ν_{M-L}, γ_{CCC} (в некоторых случаях, также и υ_{CC}), в сравнении с экспериментальными, а для остальных колебаний – наоборот. Это можно объяснить влиянием d-орбиталей атома железа и изменением энергии молекулярных орбиталей в результате образования π-комплекса атома железа с циклопентадиенильным кольцом. Теоретический расчёт по методу **II** (табл. 2) с использованием трёх d-поляризационных функций позволил уменьшить эту разницу. Введение диффузионной функции в выбранный базис для атома железа (в выражении базиса показан знаком «+») в расчёте по методу **III** позволил максимально приблизить теоретические значения для колебания υ_{CC} к экспериментальным результатам. Применение корреляционно-согласованных поляризационных базисов [8] (методы **IV** и **V**)также приводит к уменьшению разницы. Наиболее близкими к экспериментальным оказались колебательные спектры, расчитанные по методу **V** с применением одной d-поляризационной функции для атомов C, H и O.

Таблица 2.

*Квантово-химические методы, позволяющие расчитать колебательные спектры соединений **1, 2** и **3** с погрешностью менее 5%*

ONIOM метод	Базисы метода DFT/B3LYP	
	Для атома Fe	Для атомов C, H, O
I	6-31G(2d,p)	6-31G
II	6-311G(3d,p)	6-31G
III	6-311+G(3d,p)	6-31G(d)
IV	cc-pvdz	6-311G
V	cc-pvdz	6-311G(d)
VI	Lan2dz	6-311G(d)

Для достижения более полного соответствия результатов теоретического расчета экспериментальным данным необходимо ввести масштабирующий умножитель [4,8,9]. Последний определяется по формуле:

$$\xi(\text{эксп.}) = a \cdot \xi(\text{теор.}),$$

где ξ(эксп.) и ξ(теор.) – экспериментально измеренные и теоретически расчитанные величины, *а* - масштабирующий умножитель.

Ранее в работах [4, 8-10] авторы предложили применять лишь один масштабирующий умножитель для целого спектра в широком диапазоне. Однако, из-за неоднозначности природы различных колебаний молекулы вычисленные значения волновых чисел для некоторых из этих колебаний будут располагаться несколько выше, чем экспериментальные, а остальные, наоборот, чуть ниже. Учитывая это обстоятельство, в настоящей работе сопоставлением колебательных спектров молекул **2** и **3** со спектром соединения **1** отдельно проанализированы колебания, относящиеся к звену ферроцена. Путём обобщения для каждого вида однотипных колебаний нами по вышеприведенной формуле были рассчитаны значения масштабирующих умножителей относительно каждого экспериментального результата, приведенного в различных источниках. Полученные среднеарифметические значения масштабирующих умножителей для разных колебаний в молекулах исследуемых соединений приведены в таблице 3.

Как видно из табл. 3, значения масштабирующих множителей для разных колебаний достаточно близки к единице, что позволяет утверждать адекватность выбранной теоретической модели расчёта. Несмотря на то, что найденные масштабирующие множители мало отличаются от единицы, их учёт позволяет более точно оценить положение максимума полосы поглощения того или иного колебания.

Пользуясь значениями усреднённых масштабирующих множителей, приведённых в таблице 3, можно вычислить колебательные спектры разных гетероаннулярно дизамещенных производных ферроцена с электроннодонорным (**2**) и электронноакцепторным (**3**) заместителями.

Таблица 3.

Усреднённые значения масштабирующих умножителей положений максимумов полос поглощений в колебательных спектрах веществ **1-3**

Тип колебания	Вещество	Метод											
		I				II				III			
		a*	b	c	среднее	a	B	C	Среднее	a	b	c	среднее
δ_{CpMCp}	**1**	1,036	1,091		**1,063**	0,984	1,036		**1,010**	1,016	1,070		**1,043**
	2												
	3												
ν_{M-L}	**1**	1,047	1,055	1,052	**1,051**	1,058	1,065	1,063	**1,062**	1,025	1,032	1,030	**1,029**
	2	1,006	1,010		**1,008**	1,010	1,013		**1,012**	1,011	1,015		**1,013**
	3	1,033	1,039	1,022	**1,031**	1,047	1,053	1,036	**1,045**	1,018	1,024	1,007	**1,016**
χ_{CCC}	**1**	0,849	1,017	0,990	**0,952**	0,853	1,018	0,994	**0,955**	0,852	1,020	0,993	**0,955**
	2	1,002	1,001		**1,002**	1,001	1,000		**1,001**	1,000	0,999		**1,000**
	3	1,018	1,018	1,041	**1,026**	1,022	1,022	1,046	**1,030**	1,019	1,019	1,042	**1,026**
ρ_{CH}	**1**	0,967	1,018	0,983	**0,989**	0,968	1,019	0,984	**0,990**	0,981	1,032	0,998	**1,004**
	2	0,983	0,979		**0,981**	0,994	0,990		**0,992**	0,982	0,978		**0,980**
	3	0,956	0,967	0,981	**0,968**	0,958	0,968	0,982	**0,969**	0,969	0,979	0,990	**0,979**
γ_{CCC}	**1**	1,078		1,032	**1,055**	1,079		1,033	**1,056**	1,097		1,050	**1,073**

	2	0,981	0,980		**0,981**	0,996	0,995		**0,996**	0,980	0,980		**0,980**
	3	0,980	0,972	0,979	**0,977**	0,981	0,972	0,980	**0,978**	0,993	0,984	0,991	**0,989**
β_{CH}	**1**	0,997	1,003	0,959	**0,986**	0,997	1,002	0,960	**0,986**	1,011	1,013	0,971	**0,998**
	2	0,989	0,984		**0,987**	1,003	0,998		**1,001**	0,988	0,984		**0,986**
	3	0,966	0,969	0,998	**0,978**	0,966	0,969	0,998	**0,978**	0,981	0,985	1,014	**0,993**
υ_{CC}	**1**	1,010	0,976	0,974	**0,987**	1,010	0,994	0,974	**0,993**	1,004	0,970	0,968	**0,980**
	2	1,000	0,999		**1,000**	1,004	1,003		**1,004**	0,999	0,999		**0,999**
	3	0,976	0,979	0,983	**0,979**	0,976	0,979	0,982	**0,979**	0,978	0,980	0,984	**0,981**
υ_{CH}	**1**	0,940	0,942	0,942	**0,941**	0,940	0,942	0,942	**0,941**	0,949	0,952	0,952	**0,951**
	2	1,002	1,002		**1,002**	1,011	1,011		**1,011**	1,001	1,001		**1,001**
	3	0,935	0,932	0,938	**0,935**	0,935	0,932	0,937	**0,935**	0,944	0,942	0,947	**0,944**

Тип колебания	Вещество	Метод											
		IV				**V**				**VI**			
		a	b	c	среднее	a	B	C	среднее	a	b	c	среднее
$\delta_{срмср}$	**1**	1,072	1,129		**1,101**	1,045	1,100		**1,072**	1,012	1,065		**1,038**
	2												
	3												
ν_{M-L}	**1**	1,100	1,107	1,105	**1,104**	1,042	1,050	1,047	**1,047**	1,080	1,088	1,086	**1,085**
	2	1,035	1,039		**1,037**	1,018	1,022		**1,020**	1,021	1,006		**1,014**
	3	1,027	1,033	1,016	**1,026**	1,031	1,037	1,020	**1,029**	1,015	1,020	1,004	**1,013**
χ_{CCC}	**1**	0,864	1,024	1,007	**0,965**	0,846	1,014	0,986	**0,949**	0,850	1,007	0,991	**0,949**
	2	1,024	1,023		**1,024**	0,995	0,995		**0,995**	1,004	0,508		**0,756**
	3	1,042	1,042	1,066	**1,050**	1,012	1,012	1,036	**1,020**	1,016	1,016	1,040	**1,024**
ρ_{CH}	**1**	0,991	1,041	1,002	**1,011**	0,986	1,038	1,003	**1,009**	0,990	1,041	1,006	**1,012**
	2	1,002	0,998		**1,000**	1,000	0,996		**0,998**	1,003	0,690		**0,847**
	3	0,950	0,960	0,966	**0,959**	0,977	0,987	1,002	**0,989**	0,996	1,007	1,028	**1,010**
γ_{CCC}	**1**	1,089		1,043	**1,066**	1,105		1,058	**1,082**	1,104		1,057	**1,080**
	2	0,998	0,997		**0,998**	0,998	0,998		**0,998**	0,999	0,999		**0,999**
	3	0,974	0,965	0,972	**0,971**	0,996	0,987	0,995	**0,993**	1,010	1,001	1,009	**1,007**
β_{CH}	**1**	1,009	1,016	0,970	**0,998**	1,020	1,022	0,981	**1,008**	1,022	1,027	0,983	**1,010**
	2	0,998	0,994		**0,996**	1,011	1,006		**1,009**	1,013	1,009		**1,011**
	3	0,965	0,968	0,996	**0,976**	0,989	0,993	1,022	**1,002**	0,999	1,002	1,032	**1,011**
υ_{CC}	**1**	1,022	0,988	0,985	**0,998**	1,016	0,998	0,980	**0,998**	1,023	0,988	0,986	**0,999**
	2	1,009	1,008		**1,009**	1,013	1,013		**1,013**	1,017	0,818		**0,918**
	3	0,975	0,978	0,981	**0,978**	0,988	0,991	0,995	**0,991**	1,001	1,004	1,007	**1,004**
υ_{CH}	**1**	0,949	0,952	0,952	**0,951**	0,956	0,958	0,958	**0,957**	0,955	0,958	0,958	**0,957**
	2	1,013	1,013		**1,013**	1,018	1,018		**1,018**	1,018	1,018		**1,018**
	3	0,959	0,957	0,962	**0,959**	0,951	0,948	0,954	**0,951**	0,940	0,938	0,943	**0,941**

* литература: a – **1** [11], **2** [18], **3** [20]; b – **1** [12], **2** [19], **3** [21], c – **1** [13, 14], **3** [17].

Таким образом, сопоставительный анализ колебательных спектров ферроцена и некоторых его гетероаннулярно дизамещенных производных с привлечением квантово-химических расчётов позволил провести однозначные отнесения полос поглощений в их ИК-спектрах.

Установлено, что наиболее близкими результатами экспериментальным спектрам оказались вычисленные данные с использованием специальной процедуры ONIOM гибридного метода теории функционала плотности DFT/B3LYP с базисами cc-pvdz для атома Fe и 6-311G(d) для атомов C, H, O. С целью устранения не столь существенной разницы расчётных значений волновых чисел положения максимумов полос от экспериментальных данных нами введены усредненные значения масштабирующих коэфициентов для отдельных типов колебаний исследуемых молекул.

Литература:

1. Перевалова Э.Г., Решетова М.Д., Грандберг К.И., Железоорганические соединения. Ферроцен.- М.: Наука, 1983.- 544 с.
2. Несмеянов А.Н., Химия ферроцена.- М.: Наука, 1969.- 606 с.
3. Аскаров И.Р. Ферроцен и его производные.- Фергана, 1999.- 206 с.
4. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView.- М.: Солон-пресс, 2011.- 224 с.
5. Frisch M.J. and etc., “Gaussian 09, Revision A.1” Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
6. Abdulloyev O.Sh., Ferrosenning ba'zi fizik-kimyoviy tavsiflari kvant-kimyoviy tahlili. // “XXI asr – Intellektual avlod asri” ilmiy-amaliy anjuman.Andijon.- 2015.-B. 137-140.
7. Аскаров И.Р., Абдуллоев О.Ш., Абдуллоев Ш.Х., Анализ результатов квантово-химических расчетов геометрических и энергетических характеристик молекулы ферроцена. // *Материалы междунар. конф. “Актуальные проблемы отраслей химической технологии” (Бухара, 10-12 ноября 2015), Ташкент, 2015.- С. 307-309.*
8. Becke A.D., *J. Chem. Phys.,* 1993, 98, 1372-1377.
9. Серба П.В., Мирошниченко С.П., Блинов Ю.Ф., Квантово-химические расчеты в программе GAUSSIAN по курсу «Физика низкоразмерных структур». Таганрог: ТТИ ЮФУ, 2012.- 100 с.
10. Jr. Dunning T. H., *J.Chem. Phys.,*1989, 90,1007-23.
11. Lippincott E. П., Nelson R.D., *Spectrochim. acta,* 1958, 10, 307.
12. Hartley D., Ware M. I., *J. Chem. Soc. A,* 1969, 138.
13. Кимельфельд Я. М., Смирнова Е. М., Алексанян В. Т., Лубович А. А., *Журн. структур. химии,* 1973, 14, 826.
14. Aleksanyan V.T., Lokshin B.V., *J. Organometal. chem.,* 1977, vol. 131,p. 113.
15. Fritz H.P., Schafer L., *Chem. Ber.,* 1964, 97, 1829.
16. Aleksanyan V.T., Borisov G.K., Devyatych G.G. et al., *J. Raman. Spectros.,* 1974, 2, 345.
17. Cryaznova T.P., et al., *J. Organomet. Chem.,* 2010, 695, 2586-2595.
18. ChemicalBook, “1,1'-Diacetylferrocene(1273-94-5)IR1,” 2008. http://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_1273-94-5_IR1.htm.
19. ChemicalBook, “1,1'-Diacetylferrocene(1273-94-5)IR2,” 2008. http://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_1273-94-5_IR2.htm.
20. ChemicalBook, “1,1'-DIMETHYLFERROCENE(1291-47-0)IR1,” 2008. http://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_1291-47-0_IR1.htm.
21. ChemicalBook, “1,1'-DIMETHYLFERROCENE(1291-47-0)IR2,” 2008. http://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_1291-47-0_IR2.htm.
22. Mohamadi N., etc. J. Organomet. Chem., 2012, v.713, p.51-59.

Андижон давлат университети,
2017 йил 3 апрелда қабул қилинган
(Тақризчи: доц. Ш.Қирғизов)