

УДК 547.65:544.183.25

В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, А. А. Денисов,
А. П. Князев, О. В. Стоянов, Г. Е. ЗаиковКВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛ А ЦЕНАФТАЛЕНА
И 1,2-ДИГИДРОНАФТАЛИНА МЕТОДОМ АВ INITIO

Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод АВ INITIO, аценафтаден и 1,2-дигидронафталин, кислотная сила.

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина методом АВ INITIO в базисе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила ($pK_a = 36$). Установлено, что молекулы аценафтадена и 1,2-дигидронафталина относятся к классу очень слабых кислот ($pK_a > 14$).

Keywords: quantum chemical calculation, method AB INITIO, atsenaftalene and 1,2-dihydronaftalin, acid strength.

For the first time it is executed quantum chemical calculation the molecules of atsenaftalene and 1,2-dihydronaftalin method AB INITIO with optimization of geometry on all parameters. The optimized geometrical and electronic structure of this connection is received. Acid force of atsenaftalene and 1,2-dihydronaftalin is theoretically appreciated. It is established, than it to relate to a class of very weak H-acids ($pK_a = +36$, where pK_a -universal index of acidity).

Введение

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина [1] методом АВ INITIO в базисе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [3].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина получена методом АВ INITIO в базисе 6-311G** и показаны на рис.1-2 и в табл.1-2. Используя известную формулу $pK_a = 49,04 - 134,61 q_{\max}^{H^+}$ [4] ($q_{\max}^{H^+} = +0,10$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности), которая с успехом используется, например, в работах [5-9], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 36$.



Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы аценафтадена.
($E_0 = -1203410$ кДж/моль, $E_{эл} = -2815139$ кДж/моль)

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина методом АВ INITIO в базисе 6-311G**. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 36$. Установлено, что аценафтаден и 1,2-дигидронафталин относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$).

Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы аценафтадена

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град
C(2)-C(1)	1,41	C(1)-C(2)-C(3)	125
C(3)-C(2)	1,38	C(9)-C(10)-C(3)	120
C(3)-C(10)	1,42	C(2)-C(3)-C(4)	116
C(4)-C(3)	1,42	C(3)-C(4)-C(5)	120
C(5)-C(4)	1,36	C(1)-C(6)-C(5)	118
C(5)-C(6)	1,43	C(2)-C(1)-C(6)	118
C(6)-C(1)	1,36	C(1)-C(2)-C(7)	110
C(7)-C(2)	1,41	C(11)-C(18)-C(7)	109
C(7)-C(18)	1,48	C(2)-C(7)-C(8)	118
C(8)-C(7)	1,36	C(7)-C(8)-C(9)	118
C(9)-C(8)	1,43	C(8)-C(9)-C(10)	123
C(10)-C(9)	1,36	C(2)-C(1)-C(11)	106
C(11)-C(1)	1,48	C(1)-C(6)-H(12)	122
H(12)-C(6)	1,08	C(4)-C(5)-H(13)	119
H(13)-C(5)	1,08	C(3)-C(4)-H(14)	120
H(14)-C(4)	1,08	C(9)-C(10)-H(15)	120
H(15)-C(10)	1,08	C(8)-C(9)-H(16)	118
H(16)-C(9)	1,08	C(7)-C(8)-H(17)	122
H(17)-C(8)	1,08	C(1)-C(11)-C(18)	109
C(18)-C(11)	1,34	C(1)-C(11)-H(19)	125
H(19)-C(11)	1,07	C(11)-C(18)-H(20)	126
H(20)-C(18)	1,07		

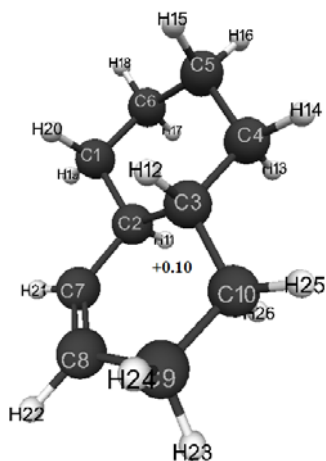


Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,2-дигидронафталина ($E_0 = -1017124$ кДж/моль, $E_{эл} = -2470782$ кДж/моль)

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,2-дигидронафталина

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град
C(2)-C(1)	1,53	C(1)-C(2)-C(3)	111
C(3)-C(2)	1,54	C(2)-C(3)-C(4)	110
C(4)-C(3)	1,53	C(3)-C(4)-C(5)	111
C(5)-C(4)	1,53	C(1)-C(6)-C(5)	112
C(5)-C(6)	1,53	C(2)-C(1)-C(6)	111
C(6)-C(1)	1,53	C(1)-C(2)-C(7)	113
C(7)-C(2)	1,51	C(2)-C(7)-C(8)	124
C(8)-C(7)	1,32	C(7)-C(8)-C(9)	124
C(9)-C(8)	1,51	C(3)-C(10)-C(9)	111
C(9)-C(10)	1,53	C(2)-C(3)-C(10)	110
C(10)-C(3)	1,53	C(1)-C(2)-H(11)	107
H(11)-C(2)	1,09	C(2)-C(3)-H(12)	107
H(12)-C(3)	1,09	C(3)-C(4)-H(13)	109
H(13)-C(4)	1,09	C(3)-C(4)-H(14)	110
H(14)-C(4)	1,09	C(4)-C(5)-H(15)	109
H(15)-C(5)	1,09	C(4)-C(5)-H(16)	110
H(16)-C(5)	1,09	C(1)-C(6)-H(17)	109
H(17)-C(6)	1,09	C(1)-C(6)-H(18)	110
H(18)-C(6)	1,09	C(2)-C(1)-H(19)	110
H(19)-C(1)	1,09	C(2)-C(1)-H(20)	109
H(20)-C(1)	1,09	C(2)-C(7)-H(21)	117
H(21)-C(7)	1,08	C(7)-C(8)-H(22)	119
H(22)-C(8)	1,08	C(8)-C(9)-H(23)	109
H(23)-C(9)	1,09	C(8)-C(9)-H(24)	109
H(24)-C(9)	1,09	C(3)-C(10)-H(25)	111
H(25)-C(10)	1,09	C(3)-C(10)-H(26)	109
H(26)-C(10)	1,09		

Литература

1. Дж Кеннеди. *Катионная полимеризация олефинов*. Изд-во «Мир»— М., 1978. — 431 с.
2. M.W. Shmidt, K.K. Baldrosge, J.A. Elbert, M.S. Gordon, and anothers General Atomic and Molecular Electronic Structure Systems. *J. Comput. Chem.* №14. P. 1347-1363, 1993
3. B.M. Bode and M.S. Gordon. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. *J. Molec. Graphics.* №16. P. 133-138, 1998.
4. V.A. Babkin, R.G. Fedunov, K.S. Minsker. and anothers. Oxidation communication, 2002, №1, 25, 21-47.
5. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, О. В. Савченко, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[3, 1, 0]гексана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 109-110, 2012
6. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, О. В. Савченко, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков Квантово-химический расчет молекулы бицикло[4, 1, 0]гептана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 111-112, 2012
7. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, С. Е. Карпушова, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[5, 1, 0]октана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 113-114, 2012
8. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, В. Ю. Дмитриев, Н. Е. Темникова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[6, 1, 0]нонана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 115-116, 2012
9. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, В. Ю. Дмитриев, Л. Е. Кузнецова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[10, 1, 0]тридекана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 117-118, 201

© **В. А. Бабкин** - д-р хим. наук, проф., зам. дир. по научной работе Себряковского филиала Волгоградского госуд. архитектурно-строительного ун-та; **Д. С. Андреев** – студ. того же ун-та; **А. А. Денисов** – канд. с/х наук, доц. того же ун-та; **А. П. Князев** – канд. геогр. наук, доц. того же ун-та; **О. В. Стоянов** – д-р техн. наук, проф., зав. каф. технологии пластических масс КНИТУ, ov_stoyanov@mail.ru; **Г. Е. Заиков** - д-р хим. наук, проф., Институт биохимической физики РАН.