

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул некоторых пиримидинов 2-аллилсульфанил-6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН, 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-изопропилпиримидин-4(3H)-ОН и 6-метил-2-(4-пропоксибензилсульфанил)пиримидин-4(3H)-ОН методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом встроенным в PC GAMESS[1], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [2].

Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН, 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-изопропилпиримидин-4(3H)-ОН и 6-метил-2-(4-пропоксибензилсульфанил)пиримидин-4(3H)-ОН получено методом MNDO и показано на рис.1-3 и в табл.1-4. Применяя известную формулу [3-4] $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{max}H^+$ (где $q_{max}H^+ = +0,22$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности), с успехом используемую, например в работах[5-15], находим значение кислотной силы этих соединений $pK_a=11$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН, 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-изопропилпиримидин-4(3H)-ОН и 6-метил-2-(4-пропоксибензилсульфанил)пиримидин-4(3H)-ОН методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединения. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a=11$. Установлено, что молекулы этих пиримидинов обладают одинаковой кислотной силой и относится к классу слабых Н-кислот ($pK_a > 9$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН. ($E_0 = -333824$ кДж/моль, $E_{эл} = -2054433$ кДж/моль)

Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	C(2)-C(8)	H(3)-C(1)	H(4)-C(1)
H(5)-C(1)	H(6)-C(2)	H(7)-C(2)	C(8)-C(9)
C(9)-N(12)	C(10)-C(8)	N(11)-C(10)	N(12)-C(13)
C(13)-N(11)	O(14)-C(9)	C(15)-C(10)	C(15)-C(18)
H(16)-C(15)	H(17)-C(15)	C(18)-C(20)	C(19)-C(18)
C(20)-C(21)	C(21)-C(22)	C(22)-C(23)	C(23)-C(19)
H(24)-N(12)	H(25)-C(19)	H(26)-C(20)	H(27)-C(21)
H(28)-C(22)	H(29)-O(23)	S(30)-C(13)	C(31)-S(30)
H(32)-C(31)	H(33)-C(31)	C(34)-C(31)	C(35)-C(34)
H(36)-C(35)	H(37)-C(35)	H(38)-C(35)	1.53
1.52	1.11	1.11	1.11
1.11	1.11	1.49	1.43
1.39	1.40	1.38	1.32
1.23	1.52	1.52	1.12
1.12	1.41	1.41	1.40
1.41	1.42	1.01	1.09
1.09	1.09	1.09	1.09
1.09	1.09	1.69	1.75
1.11	1.11	1.50	1.34
1.10	1.09	1.09	
C(2)-C(1)-H(3)	C(2)-C(1)-H(4)	C(2)-C(1)-H(5)	C(1)-C(2)-H(6)
C(1)-C(2)-H(7)	C(1)-C(2)-C(8)	C(2)-C(8)-C(9)	C(2)-C(8)-C(10)
C(8)-C(10)-N(11)	C(8)-C(9)-C(12)	C(9)-N(12)-C(13)	C(8)-C(9)-O(14)
C(8)-C(10)-C(15)	C(10)-C(15)-H(16)	C(10)-C(15)-H(17)	C(10)-C(15)-C(18)
C(15)-C(18)-C(19)	C(15)-N(18)-C(20)	C(18)-C(20)-C(21)	C(20)-C(21)-C(22)
C(21)-C(22)-C(23)			

C(22)-C(23) C(9)-N(12)-H(24) C(18)-C(19)-H(25) C(18)-C(20)-H(26) C(20)-C(21)-H(27)
 C(21)-C(22)-H(28) C(22)-C(23)-N(29) N(11)-C(13)-S(30) C(13)-S(30)-C(31) S(30)-C(31)-
 H(32) S(30)-C(31)-H(33) S(30)-C(31)-C(34) C(29)-C(30)-C(35) C(31)-C(34)-H(36) C(34)-
 C(35)-H(37) C(34)-C(35)-H(38) 110 112 112 109 109 115 117 123 122 115 122 129
 127 108 111 115 121 121 121 120 119 119 120 120 120 120 122 110 110 110
 108 126 114 122 124 C(1) C(2) H(3) H(4) H(5) H(6) H(7) C(8) C(9) C(10) N(11) N(12)
 C(13) O(14) C(15) H(16) H(17) C(18) C(19) C(20) C(21) C(22) C(23) H(24) H(25) H(26)
 H(27) H(28) H(29) S(30) C(31) H(32) H(33) C(34) C(35) H(36) H(37) H(38) 0.03 0.05 -
 0.00 0.00 -0.01 0.02 0.00 -0.22 0.40 0.12 -0.34 -0.35 0.12 -0.35 0.10 0.02 0.01 -0.08 -
 0.04 -0.03 -0.07 -0.05 -0.06 + 0.21 0.06 0.06 0.06 0.06 0.06 0.15 -0.02 0.04 0.03 -0.13
 -0.02 0.06 0.05 0.05

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы
 26-метил-2(4-пропоксибензилсуль-фанил)-пиримидин-4(3Н)-ОН (E0= -333824
 кДж/моль, Eэл= -2054433 кДж/моль) Рис.3. Геометрическое и электронное
 строение молекулы 2-аллилсульфанил -6-бензилл-5-изопропилпиримидин-4(3Н)-
 ОН. (E0= -330064 кДж/моль, Eэл= -2312665 кДж/моль Таблица 2 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы
 6-метил-2(4-пропоксибензилсульфанил)-пиримидин-4(3Н)-ОН Длины связей R,Å
 Валентные углы Град Атом Заряды на атомах молекулы C(1)-C(2) C(2)-C(3) C(3)-
 N(15) C(4)-N(14) C(5)-C(3) C(6)-C(7) C(7)-C(8) C(8)-C(9) C(9)-C(10) C(10)-C(11) C(11)-
 C(12) C(12)-C(7) O(13)-C(1) N(14)-C(1) N(15)-C(4) S(16)-C(6) H(17)-C(5) H(18)-C(5)
 H(19)-C(5) H(20)-N(14) H(21)-C(6) H(22)-C(6) H(23)-C(12) H(24)-C(11) H(25)-C(9) H(26)-
 C(8) H(27)-C(2) O(28)-C(10) C(29)-O(28) C(30)-C(29) H(31)-C(30) H(32)-C(30) H(33)-
 C(29) H(34)-C(29) C(35)-C(30) H(36)-C(35) H(37)-C(35) H(38)-C(35) 1.47 1.34 1.40 1.39
 1.51 1.51 1.42 1.40 1.42 1.42 1.40 1.41 1.23 1.43 1.23 1.75 1.11 1.11 1.11 1.00 1.11
 1.11 1.09 1.09 1.09 1.09 1.09 1.37 1.41 1.55 1.11 1.11 1.12 1.12 1.53 1.11 1.11 1.11
 C(1)-C(2)-C(3) C(3)-N(15)-C(4) C(2)-C(3)-C(5) C(4)-S(16)-C(6) S(16)-C(6)-C(7) C(4)-
 C(5)-C(6) C(2)-C(1)-C(7) C(6)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(8)-C(9)-C(10) C(9)-C(10)-C(11)
 C(6)-C(7)-C(12) C(2)-C(1)-O(13) C(2)-C(1)-N(14) C(2)-C(3)-N(15) N(14)-C(4)-S(16) C(3)-
 C(5)-H(17) C(3)-C(5)-H(18) C(3)-C(5)-H(19) C(1)-N(14)-H(20) C(7)-C(6)-H(21) C(7)-C(6)-
 H(22) C(7)-C(12)-H(23) C(10)-C(11)-H(24) C(8)-C(9)-H(25) C(7)-C(8)-H(26) C(8)-C(9)-
 H(27) C(9)-C(10)-O(28) C(10)-O(28)-C(29) O(28)-C(29)-C(30) C(29)-C(30)-H(31) C(29)-
 C(30)-H(32) O(28)-C(29)-H(33) O(28)-C(29)-H(34) C(29)-C(30)-C(35) C(30)-C(35)-H(36)
 C(30)-C(35)-H(37) C(30)-C(35)-H(38) 121 120 125 111 109 120 121 121 121 120 119
 121 129 114 121 116 111 111 111 119 111 111 120 122 119 120 117 117 124 114
 111 111 105 112 114 112 110 112 C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6) C(7) C(8) C(9) C(10)
 C(11) C(12) O(13) N(14) N(15) S(16) H(17) H(18) H(19) H(20) H(21) H(22) H(23) H(24)
 H(25) H(26) H(27) O(28) C(29) C(30) H(31) H(32) H(33) H(34) C(35) C(36) H(37) H(38)
 0.39 -0.20 0.09 0.12 0.08 0.00 -0.13 -0.00 -0.09 0.14 -0.12 0.00 -0.34 -0.36 -0.33 0.15
 -0.00 0.01 0.01 + 0.21 0.03 0.03 0.06 0.07 0.08 0.06 0.09 -0.29 0.18 -0.06 0.02 0.01
 0.03 -0.00 0.03 -0.00 -0.00 -0.00 Таблица 3 - Оптимизированные длины связей,
 валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-аллилсульфанил -6-бензилл-5-

изопропилпиримидин-4(3H)-ОН Длины связей R,А Валентные углы Град Атом
 Заряды на атомах молекулы C(2)-C(1) C(3)-C(2) H(4)-C(1) H(5)-C(1) H(6)-C(3) H(7)-
 C(1) H(8)-C(3) H(9)-C(3) H(10)-C(2) C(11)-C(2) C(12)-C(11) C(13)-C(11) N(14)-C(13)
 N(15)-C(12) C(16)-N(14) O(17)-C(12) C(18)-C(13) H(19)-C(18) H(20)-C(18) C(21)-C(18)
 C(22)-C(21) C(23)-C(21) C(24)-C(23) C(25)-C(24) C(26)-C(25) C(26)-C(22) H(27)-N(15)
 H(28)-C(22) H(29)-O(23) H(30)-C(24) H(31)-C(25) H(32)-C(26) S(33)-C(16) C(34)-S(33)
 H(35)-C(34) H(36)-C(34) C(37)-C(34) C(38)-C(37) H(39)-C(37) H(40)-C(38) H(41)-C(38)
 1.55 1.55 1.11 1.11 1.11 1.11 1.11 1.11 1.12 1.53 1.49 1.39 1.40 1.43 1.32 1.23 1.53
 1.12 1.11 1.52 1.42 1.42 1.41 1.40 1.41 1.41 1.01 1.09 1.09 1.09 1.09 1.09 1.69 1.75
 1.53 1.11 1.50 1.34 1.11 1.09 1.09 C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(1)-H(4) C(2)-C(1)-H(5) C(2)-
 C(3)-H(6) C(2)-C(1)-H(7) C(2)-C(3)-H(8) C(2)-C(3)-H(9) C(1)-C(2)-H(10) C(1)-C(2)-C(11)
 C(2)-C(11)-C(12) C(2)-C(11)-C(13) C(11)-C(13)-N(14) C(11)-C(12)-N(15) C(13)-N(14)-
 C(16) C(11)-C(12)-O(17) C(11)-C(13)-C(18) C(13)-C(18)-H(19) C(13)-C(18)-H(20) C(13)-
 C(18)-C(21) C(18)-C(21)-C(22) C(18)-C(21)-C(23) C(10)-C(23)-C(24) C(23)-C(24)-C(25)
 C(21)-C(22)-C(26) C(12)-N(15)-H(27) C(21)-C(22)-H(28) C(21)-C(23)-H(29) C(23)-C(24)-
 H(30) C(24)-C(25)-H(31) C(22)-C(26)-H(32) N(14)-C(16)-S(33) C(16)-S(33)-C(34) S(33)-
 C(34)-H(35) S(33)-C(34)-H(36) S(33)-C(34)-C(37) C(34)-C(37)-H(39) C(34)-C(37)-C(38)
 C(37)-C(38)-H(40) C(37)-C(38)-H(41) 113 113 110 111 111 110 114 104 113 118 124
 122 115 121 129 128 107 112 114 121 121 121 120 121 119 120 120 120 119
 122 111 110 111 108 114 126 122 124 C(2) C(3) H(4) H(5) H(6) H(7) H(8) H(9) H(10)
 C(11) C(12) C(13) N(14) N(15) C(16) O(17) C(18) H(19) H(20) C(21) C(22) C(23) C(24)
 C(25) C(26) H(27) H(28) H(29) H(30) H(31) H(32) S(33) C(34) H(35) H(36) C(37) C(38)
 H(39) H(40) H(41) 0.01 0.04 -0.01 0.01 -0.01 -0.01 -0.01 0.01 0.01 -0.20 0.40 0.12 -
 0.34 -0.35 0.12 -0.35 0.10 0.02 0.01 -0.08 -0.04 -0.03 -0.07 -0.05 -0.06 +0.21 0.06
 0.06 0.06 0.06 0.06 0.15 -0.02 0.04 0.03 -0.13 -0.02 0.06 0.05 0.05 Таблица 4 -
 Общая энергия (E0), электронная энергия (Еэл), максимальный заряд на атоме
 водорода (qmaxH+), универсальный показатель кислотности (pKa) молекул
 пиримидинов № Пиримидины -E0 кДж/моль -Еэл кДж/моль qmaxH+ pKa 1 2-
 аллилсульфанил -6-бензил-5-этилпиримидин-4(3H)-ОН 333824 2054433 +0.21 11
 2 6-метил-2-(4-пропоксибензилсульфанил)- пиримидин-4(3H)-ОН 333824 2054433
 +0.21 11 3 2-аллилсульфанил -6-бензил-5-изопропилпиримидин-4(3H)-ОН
 330064 2312665 +0.21 11