

Введение Молекулы триборатолов могут являться фрагментами моделей таких оптических стекол, как например, «Легкий крон» [1]. До настоящего времени квантовохимические расчеты триборатолов в рамках полимерных моделей оптических стекол практически не выполнялись. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул 1,3-ди(алюмоксандиол) триборатола-5 и 1-(алюмоксандиол),3-силоксандиол триборатола-5 методом MNDO 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 моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt[3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул 1,3-ди(алюмоксандиол)триборатола-5 и 1-(алюмоксандиол),3-силоксандиол триборатола-5 получены методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-2. Применяя известную формулу $pK_a = 42,11 - 147,18 \cdot \sigma$ [4] ($\sigma = +0,21$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности), которая с успехом используется, например, в работах [5-15], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 11$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 1,3-ди(алюмоксандиол)триборатола-5 и 1-(алюмоксандиол), 3-силоксандиол триборатола-5 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 11$. Установлено, что 1,3-ди(алюмоксандиол)триборатол-5 и 1-(алюмоксандиол),3-силоксандиол триборатол-5 обладают одинаковой кислотной силой, и относятся к классу слабых Н-кислот (9