

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул бицикло[6, 1, 0]нонана и бицикло[5,1,0]октана — соединений с малыми циклами, которые являются классическими мономерами катионной полимеризации [1], 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 бицикло[6, 1, 0]нонана и бицикло[5,1,0]октана получены методом MNDO и показаны на рис. 1-2 и в табл.1-2. Применяя известную формулу $pK_a = 42,11 - 147,18 \cdot \rho$ [4-5] ($\rho = +0,04$ - максимальные заряды на атомах водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1-2), которая с успехом используется, например, в работах [6-15], находим значения кислотной силы равные $pK_a = 36$. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы бицикло[6, 1, 0]нонана ($E_0 = -132940$ кДж/моль, $E_{эл} = -739496$ кДж/моль) Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул бицикло[6, 1, 0]нонана и бицикло[5,1,0]октана методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценены их кислотная сила $pK_a = 36$. Установлено, что бицикло[6, 1, 0]нонан и бицикло[5,1,0]октан относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бицикло[6, 1, 0]нонана

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды на атомах
C(1)-C(2) 1,52	C(1)-C(2)-C(3) 121	C(1) 0,04
C(2)-C(3) 1,54	C(2)-C(3)-C(4) 117	C(2) 0,04
C(3)-C(4) 1,54	C(3)-C(4)-C(5) 117	C(3) 0,04
C(4)-C(5) 1,54	C(4)-C(5)-C(6) 118	C(4) 0,04
C(5)-C(6) 1,54	C(5)-C(6)-C(8) 115	C(5) 0,04
C(6)-C(8) 1,54	C(6)-C(8)-C(7) 131	C(6) 0,04
C(7)-C(1) 1,52	C(7)-C(1)-C(2) 129	C(7) 0,04
C(8)-C(7) 1,53	C(8)-C(7)-C(9) 111	C(8) 0,04
C(9)-C(7) 1,11	C(9)-C(7)-H(10) 107	C(9) 0,04
H(10)-C(8) 1,12	C(10)-C(8)-C(9) 110	H(10) 0,04
H(11)-C(6) 1,11	C(11)-C(6)-C(5) 107	H(11) 0,04
H(12)-C(5) 1,12	C(12)-C(5)-C(4) 113	H(12) 0,04
H(13)-C(5) 1,11	C(13)-C(5)-H(12) 108	H(13) 0,04
H(14)-C(4) 1,10	C(14)-C(4)-C(3) 119	H(14) 0,04
H(15)-C(4) 1,10	C(15)-C(4)-H(14) 109	H(15) 0,04
H(16)-C(3) 1,11	C(16)-C(3)-C(2) 108	H(16) 0,04
H(17)-C(3) 1,12	C(17)-C(3)-H(16) 120	H(17) 0,04
H(18)-C(2) 1,11	C(18)-C(2)-C(1) 113	H(18) 0,04
H(19)-C(2) 1,12	C(19)-C(2)-H(18) 109	H(19) 0,04
H(20)-C(1) 1,10	C(20)-C(1)-C(2) 108	H(20) 0,04
H(21)-C(9) 1,11	C(21)-C(9)-C(8) 113	H(21) 0,04
H(22)-C(9) 1,12	C(22)-C(9)-H(21) 108	H(22) 0,04
H(23)-C(9) 1,11	C(23)-C(9)-H(22) 113	H(23) 0,04
H(24)-C(8) 1,12	C(24)-C(8)-C(7) 108	H(24) 0,04
H(25)-C(7) 1,11	C(25)-C(7)-C(6) 113	H(25) 0,04

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бицикло[5,1,0]октана

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды на атомах
C(2)-C(1) 1,54	C(2)-C(1)-C(3) 121	C(2) 0,04
C(3)-C(1) 1,52	C(3)-C(1)-C(4) 117	C(3) 0,04
C(4)-C(3) 1,54	C(4)-C(3)-C(5) 117	C(4) 0,04
C(5)-C(2) 1,52	C(5)-C(2)-C(1) 118	C(5) 0,04
C(5)-C(6) 1,54	C(5)-C(6)-C(7) 115	C(6) 0,04
C(6)-C(7) 1,54	C(6)-C(7)-C(4) 131	C(7) 0,04
C(7)-C(4) 1,52	C(7)-C(4)-C(8) 129	C(8) 0,04
C(8)-C(2) 1,54	C(8)-C(2)-C(1) 111	C(9) 0,04
C(8)-C(1) 1,53	C(8)-C(1)-C(2) 107	C(10) 0,04
H(9)-C(1) 1,10	C(9)-C(1)-C(2) 107	H(9) 0,04
H(10)-C(2) 1,10	C(10)-C(2)-C(1) 110	H(10) 0,04
H(11)-C(3) 1,12	C(11)-C(3)-C(4) 111	H(11) 0,04
H(12)-C(3) 1,11	C(12)-C(3)-C(5) 112	H(12) 0,04
H(13)-C(4) 1,11	C(13)-C(4)-C(3) 112	H(13) 0,04
H(14)-C(4) 1,12	C(14)-C(4)-C(7) 111	H(14) 0,04
H(15)-C(5) 1,11	C(15)-C(5)-C(6) 112	H(15) 0,04
H(16)-C(5) 1,12	C(16)-C(5)-H(15) 111	H(16) 0,04
H(17)-C(6) 1,10	C(17)-C(6)-C(5) 110	H(17) 0,04
H(18)-C(6) 1,10	C(18)-C(6)-H(17) 107	H(18) 0,04
H(19)-C(7) 1,12	C(19)-C(7)-C(4) 107	H(19) 0,04
H(20)-C(7) 1,11	C(20)-C(7)-H(19) 110	H(20) 0,04
H(21)-C(8) 1,12	C(21)-C(8)-C(7) 107	H(21) 0,04
H(22)-C(8) 1,11	C(22)-C(8)-H(21) 110	H(22) 0,04

C(5) C(8)-C(2)-C(5) C(4)-C(7)-C(6) C(3)-C(4)-C(7) C(1)-C(2)-C(8) C(2)-C(1)-C(8) C(2)-
C(1)-H(9) C(1)-C(2)-H(10) C(1)-C(3)-H(11) C(1)-C(3)-H(12) C(3)-C(4)-H(13) C(3)-C(4)-
H(14) C(2)-C(5)-H(15) C(6)-C(5)-H(15) C(2)-C(5)-H(16) C(6)-C(5)-H(16) C(7)-C(6)-H(17)
C(7)-C(6)-H(18) C(4)-C(7)-H(19) C(4)-C(7)-H(20) C(2)-C(8)-H(21) C(1)-C(8)-H(21) C(2)-
C(8)-H(22) C(1)-C(8)-H(22) 61 115 124 115 124 117 124 118 117 60 60 115 115 108
111 110 108 108 108 111 109 110 107 107 109 120 120 119 119 Рис. 2 -

Геометрическое и электронное строение молекулы бицикло[5, 1, 0]октана ($E_0 = -117876$ кДж/моль, $E_{эл} = -612806$ кДж/моль)