

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул бициклических олефинов 2-винилбицикло [2,2,1]гептена-2[1], бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5 и 2-винилбицикло[2,2,1]гептана методом AB 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 молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептена-2, бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5 и 2-винилбицикло[2,2,1]гептана получена методом AB INITIO в базисе 6-311G** и показаны на рис.1-3 и в табл.1-4. рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептена-2 ($E_0 = -911577$ кДж/моль, $E_{эл} = -2087342$ кДж/моль) рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5 ($E_0 = -706880$ кДж/моль, $E_{эл} = -1464665$ кДж/моль) рис. 3 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептана ($E_0 = -914725$ кДж/моль, $E_{эл} = -2141059$ кДж/моль) Используя известную формулу $pK_a = 49,04 - 134,61 + [4] (+0,11 \leq \leq +0,12 -$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности (табл.1-3), которая с успехом используется, например, в работах [5-9], находим значение кислотной силы равное $33 \leq pK_a \leq 34$. Таблица 1 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептена-2 Длины связей R,Å Валентные углы Град

С(2)-C(1)	С(3)-C(1)	С(3)-C(6)	С(4)-C(2)	С(4)-C(7)	С(5)-C(4)	С(6)-C(5)	С(7)-C(3)	Н(8)-C(1)	Н(9)-C(2)	Н(10)-C(3)	Н(11)-C(4)	Н(12)-C(5)	Н(13)-C(6)	Н(14)-C(7)	Н(15)-C(7)	Н(16)-C(2)	С(17)-C(1)	С(18)-C(17)	Н(19)-C(18)	Н(20)-C(18)	Н(21)-C(17)
1,56	1,57	1,52	1,56	1,54	1,52	1,32	1,54	1,09	1,08	1,08	1,08	1,07	1,07	1,09	1,08	1,09	1,51	1,32	1,08	1,07	1,08
С(2)-C(1)-C(3)	С(5)-C(6)-C(3)	С(1)-C(2)-C(4)	С(3)-C(7)-C(4)	С(2)-C(4)-C(5)	С(4)-C(5)-C(6)	С(1)-C(3)-C(7)	С(2)-C(1)-Н(8)	С(1)-C(2)-Н(9)	С(1)-C(3)-Н(10)	С(2)-C(4)-Н(11)	С(4)-C(5)-Н(12)	С(5)-C(6)-Н(13)	С(3)-C(7)-Н(14)	С(3)-C(7)-Н(15)	С(1)-C(2)-Н(16)	С(2)-C(1)-C(17)	С(1)-C(17)-C(18)	С(17)-C(18)-Н(19)	С(17)-C(18)-Н(20)	С(1)-C(17)-Н(21)	
102	107	103	93	106	108	100	109	113	114	114	125	127	113	113	111	119	129	121	123	114	

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5 Длины связей R,Å Валентные углы Град

С(2)-C(1)	С(3)-C(1)	С(3)-C(6)	С(4)-C(2)	С(4)-C(7)	С(5)-C(4)	С(6)-C(5)	С(7)-C(3)	Н(8)-C(1)	Н(9)-C(2)	Н(10)-C(3)	Н(11)-C(4)	Н(12)-C(5)	Н(13)-C(6)	Н(14)-C(7)	Н(15)-C(7)
1,32	1,54	1,54	1,54	1,55	1,54	1,32	1,55	1,07	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,08	1,08
С(2)-C(1)-C(3)	С(5)-C(6)-C(3)	С(1)-C(2)-C(4)	С(3)-C(7)-C(4)	С(2)-C(4)-C(5)	С(4)-C(5)-C(6)	С(1)-C(3)-C(7)	С(2)-C(1)-Н(8)	С(1)-C(2)-Н(9)	С(1)-C(3)-Н(10)	С(2)-C(4)-Н(11)	С(4)-C(5)-Н(12)	С(5)-C(6)-Н(13)	С(3)-C(7)-Н(14)	С(3)-C(7)-Н(15)	
107	107	107	92	107	107	98	128	128	116	116	125	128	113	113	

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-

химический расчет молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептена-2, бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5 и 2-винилбицикло[2,2,1]гептана методом АВ INITIO в базисе 6-311G**. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 33$. Установлено, что 2-винилбицикло[2,2,1]гептен-2, бицикло [2,2,1] гептдиена-2,5 и 2-винилбицикло[2,2,1]гептана относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 3 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-винилбицикло[2,2,1]гептана

Длины связей R, Å	
C(2)-C(1)	1,56
C(3)-C(1)	1,55
C(4)-C(2)	1,54
C(4)-C(7)	1,54
C(5)-C(4)	1,56
C(5)-C(6)	1,54
C(6)-C(3)	1,09
C(7)-C(3)	1,09
H(8)-C(1)	1,08
H(9)-C(2)	1,09
H(10)-C(3)	1,09
H(11)-C(4)	1,08
H(12)-C(5)	1,09
H(13)-C(5)	1,09
H(14)-C(6)	1,08
H(15)-C(6)	1,09
H(16)-C(7)	1,09
H(17)-C(7)	1,08
H(18)-C(2)	1,08
C(19)-C(1)	1,50
C(20)-C(19)	1,32
H(21)-C(20)	1,08
H(22)-C(20)	1,08
H(23)-C(19)	1,08

Таблица 4 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (σ), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров №

Мономер	E_0	pK_a
2-винилбицикло[2,2,1]гептена-2	911577	+0,12
бицикло[2,2,1]гептдиена-2,5	706880	+0,11
2-винилбицикло[2,2,1]гептана	914725	+0,11