

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы пентадиена-1,3 и транс,транс-гексадиена-2,4 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 молекулы пентадиена-1,3 и транс,транс-гексадиена-2,4 получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу[3] $pK_a = 42,11 - 147,18 (\sigma = +0,05 - \text{максимальный заряд на атоме водорода, } pK_a - \text{ универсальный показатель кислотности см. табл.1-3})$, которая с успехом используется, например, в работах [4-13], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 35$. Рис. 1 -

Геометрическое и электронное строение молекулы пентадиена-1,3 ($E_0 = -72433$ кДж/моль, $E_{эл} = -260071$ кДж/моль) Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы пентадиена-1,3 и транс,транс-гексадиена-2,4 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 35$. Установлено, что пентадиен-1,3 и транс,транс-гексадиена-2,4 относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 1 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы пентадиена-1,3

Длины связей R,Å	Валентные углы Град	С(2)-C(1)	С(3)-C(2)	С(4)-C(3)	Н(5)-C(1)	Н(6)-C(1)	Н(7)-C(4)	Н(8)-C(3)	Н(9)-C(2)	С(10)-C(4)	Н(11)-C(10)	Н(12)-C(10)	Н(13)-C(10)
1,34	1,47	1,35	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,10	1,50	1,11	1,11	1,11	1,11

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы транс,транс-гексадиена-2,4 ($E_0 = -87524$ кДж/моль, $E_{эл} = -345655$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы транс,транс-гексадиена-2,4

Длины связей R,Å	Валентные углы Град	С(2)-C(1)	С(3)-C(2)	С(4)-C(3)	С(5)-C(4)	С(6)-C(5)	Н(7)-C(1)	Н(8)-C(1)	Н(9)-C(1)	Н(10)-C(2)	Н(11)-C(3)	Н(12)-C(4)	Н(13)-C(5)	Н(14)-C(6)	Н(15)-C(6)	Н(16)-C(6)
1,50	1,35	1,47	1,35	1,50	1,11	1,11	1,11	1,10	1,10	1,10	1,10	1,10	1,11	1,11	1,11	1,11

Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (σ), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров № Мономер - E_0 pK_a 1 пентадиена-1,3 72433 +0,05 35 2 транс,транс-гексадиена-2,4 87524 +0,05 35