

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы мирцена и трансгексатриена-1,3,5 [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 модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [3].

Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы мируена и трансгексатриена-1,3,5 получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу [4] $pK_a = 42,11 - 147,18 (= +0,05 -$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1), которая с успехом используется, например, в работах [5-14], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 35$. Рис. 1 -

Геометрическое и электронное строение молекулы мирцена ($E_0 = -144931$ кДж/моль, $E_{эл} = -762660$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы мирцена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды на атомах
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(2) C(6)-C(5) C(7)-C(6) C(8)-C(7) C(9)-C(8) C(10)-C(8) H(11)-C(1) H(12)-C(1) H(13)-C(3) H(14)-C(4) H(15)-C(4) H(16)-C(5) H(17)-C(5) H(18)-C(6) H(19)-C(6) H(20)-C(7) H(21)-C(9) H(22)-C(9) H(23)-C(9) H(24)-C(10) H(25)-C(10) H(26)-C(10)	1,35 1,48 1,34 1,52 1,55 1,51 1,36 1,51 1,51 1,09 1,09 1,10 1,09 1,09 1,12 1,11 1,11 1,12 1,10 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(1)-C(2)-C(5) C(2)-C(5)-C(6) C(5)-C(6)-C(7) C(6)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(7)-C(8)-C(10) C(2)-C(1)-H(11) C(2)-C(1)-H(12) C(2)-C(3)-H(13) C(3)-C(4)-H(14) C(3)-C(4)-H(15) C(2)-C(5)-H(16) C(2)-C(5)-H(17) C(5)-C(6)-H(18) C(5)-C(6)-H(19) C(6)-C(7)-H(20) C(8)-C(9)-H(21) C(8)-C(9)-H(22) C(8)-C(9)-H(23) C(8)-C(10)-H(24) C(8)-C(10)-H(25) C(8)-C(10)-H(26)	121 126 122 114 113 129 120 124 124 123 114 122 124 109 109 109 109 112 111 111 113 111 111 112

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы мирцена и трансгексатриена-1,3,5 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 35$. Установлено, что мирцен и трансгексатриена-1,3,5 относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы трансгексатриена-1,3,5 ($E_0 = -84654$ кДж/моль, $E_{эл} = -316681$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы трансгексатриена-1,3,5

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды на атомах
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(6)-C(5) H(7)-C(1) H(8)-C(1) H(9)-C(2) H(10)-C(3) H(11)-C(4) H(12)-C(5) H(13)-C(6) H(14)-C(6)	1,35 1,46 1,36 1,46 1,35 1,09 1,09 1,10 1,10 1,10 1,10 1,09 1,09 C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(3)-C(4)-C(5) C(4)-C(5)-C(6) C(2)-C(1)-H(7) C(2)-C(1)-H(8) C(1)-C(2)-H(9) C(2)-C(3)-H(10) C(3)-C(4)-H(11) C(4)-C(5)-H(12) C(5)-C(6)-H(13) C(5)-C(6)-H(14)	126 125 125 126 124 122 118 115 120 116 124 122

Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный

заряд на атоме водорода (δ), универсальный показатель кислотности (pKa)
мономеров № Мономер -E0 pKa 1 мирцен 144931 +0,05 35 2 трансгексатриен-
1,3,5 84654 +0,05 35