

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 1,2-(3,3'-диинденил)этана и 3,3'-диинденила [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 1,2-(3,3'-диинденил)этана и 3,3'-диинденила получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу $pK_a = 42,11 - 147,18 \rho$ [4] ($\rho = +0,07$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл. 1-3), которая с успехом используется, например, в работах [5-14], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 32$. Рис. 1 -

Геометрическое и электронное строение молекулы 1,2-(3,3'-диинденил)этана ($E_0 = -270659$ кДж/моль, $E_{эл} = -1899175$ кДж/моль) Таблица 1 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,2-(3,3'-диинденил)этана

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды	
C(2)-C(1)	C(3)-C(1)	C(4)-C(2)	
C(4)-C(6)	C(5)-C(3)	C(6)-C(5)	
C(7)-C(3)	C(8)-C(5)	C(8)-C(9)	
C(9)-C(7)	C(10)-C(14)	C(11)-C(10)	
C(12)-C(11)	C(13)-C(12)	C(14)-C(13)	
C(15)-C(14)	C(16)-C(13)	C(16)-C(18)	
C(17)-C(15)	C(18)-C(17)	H(19)-C(2)	
H(20)-C(1)	H(21)-C(4)	H(22)-C(6)	
H(23)-C(8)	H(24)-C(8)	H(25)-C(12)	
H(26)-C(12)	H(27)-C(9)	H(28)-C(11)	
H(29)-C(16)	H(30)-C(18)	H(31)-C(17)	
H(32)-C(15)	C(33)-C(7)	C(33)-C(34)	
C(34)-C(10)	H(35)-C(33)	H(36)-C(33)	
H(37)-C(34)	H(38)-C(34)	1,41 1,40 1,40 1,41 1,44 1,40 1,49 1,52 1,52 1,37	
1,49 1,37 1,52 1,52 1,44 1,40 1,40 1,41 1,41 1,40 1,09 1,09 1,09 1,09 1,11 1,11 1,11	1,11 1,08 1,08 1,09 1,09 1,09 1,09 1,50 1,55 1,50 1,12 1,11 1,11 1,12 C(2)-C(1)-C(3)	C(1)-C(2)-C(4) C(5)-C(6)-C(4) C(1)-C(3)-C(5) C(3)-C(5)-C(6) C(1)-C(3)-C(7) C(3)-C(5)-C(8) C(7)-C(9)-C(8) C(3)-C(7)-C(9) C(3)-C(7)-C(10) C(13)-C(14)-C(10) C(10)-C(11)-C(12) C(11)-C(12)-C(13) C(12)-C(13)-C(14) C(13)-C(14)-C(15) C(12)-C(13)-C(16) C(17)-C(18)-C(16) C(14)-C(15)-C(17) C(15)-C(17)-C(18) C(1)-C(2)-H(19) C(2)-C(1)-H(20) C(2)-C(4)-H(21) C(5)-C(6)-H(22) C(5)-C(8)-H(23) C(5)-C(8)-H(24) C(11)-C(12)-H(25) C(11)-C(12)-H(26) C(7)-C(9)-H(27) C(10)-C(11)-H(28) C(13)-C(16)-H(29) C(17)-C(18)-H(30) C(15)-C(17)-H(31) C(14)-C(15)-H(32) C(3)-C(7)-C(33) C(10)-C(34)-C(33) C(7)-C(10)-C(34) C(7)-C(33)-H(35) C(7)-C(33)-H(36) C(10)-C(34)-H(37) C(10)-C(34)-H(38) 119 121 119 120 121 132 109 112 108 128 108 112 102 109 120 130 121 119 121 119 119 120 121 112 112 112 112 127 127 121 120 119 122 125 116 231 109 109 109 109	Рис. 2 -

Геометрическое и электронное строение молекулы 3,3'-диинденила ($E_0 = -240404$ кДж/моль, $E_{эл} = -1585445$ кДж/моль) Таблица 2 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3,3'-диинденила

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1)	C(3)-C(1)	C(4)-C(2)
C(4)-C(6)	C(5)-C(3)	C(6)-C(5)
C(7)-C(3)	C(7)-C(9)	C(8)-C(5)
C(9)-C(8)	C(9)-C(11)	C(10)-C(7)
C(11)-C(10)	C(12)-C(11)	C(13)-C(12)
C(13)-C(14)	C(14)-C(10)	C(15)-C(14)
C(16)-C(13)	C(16)-C(18)	

C(17)-C(15) C(18)-C(17) H(19)-C(2) H(20)-C(1) H(21)-C(4) H(22)-C(6) H(23)-C(8) H(24)-
 C(8) H(25)-C(12) H(26)-C(12) H(27)-C(9) H(28)-C(11) H(29)-C(16) H(30)-C(18) H(31)-
 C(17) H(32)-C(15) 1,42 1,40 1,40 1,42 1,45 1,40 1,45 1,55 1,53 1,55 1,57 1,36 1,55
 1,55 1,53 1,45 1,45 1,40 1,40 1,42 1,42 1,40 1,09 1,09 1,09 1,09 1,11 1,11 1,11 1,11
 1,11 1,11 1,09 1,09 1,09 1,09 C(2)-C(1)-C(3) C(1)-C(2)-C(4) C(5)-C(6)-C(4) C(1)-C(3)-
 C(5) C(3)-C(5)-C(6) C(1)-C(3)-C(7) C(8)-C(9)-C(7) C(3)-C(5)-C(8) C(5)-C(8)-C(9) C(10)-
 C(11)-C(9) C(3)-C(7)-C(10) C(7)-C(10)-C(11) C(10)-C(11)-C(12) C(11)-C(12)-C(13) C(10)-
 C(14)-C(13) C(7)-C(10)-C(14) C(10)-C(14)-C(15) C(12)-C(13)-C(16) C(17)-C(18)-C(16)
 C(14)-C(15)-C(17) C(15)-C(17)-C(18) C(1)-C(2)-H(19) C(2)-C(1)-H(20) C(2)-C(4)-H(21)
 C(5)-C(6)-H(22) C(5)-C(8)-H(23) C(5)-C(8)-H(24) C(11)-C(12)-H(25) C(11)-C(12)-H(26)
 C(8)-C(9)-H(27) C(10)-C(11)-H(28) C(13)-C(16)-H(29) C(17)-C(18)-H(30) C(15)-C(17)-
 H(31) C(14)-C(15)-H(32) 119 121 119 121 119 133 103 112 103 266 149 94 103 103
 106 149 133 128 121 119 121 119 120 120 121 111 112 111 113 110 115 121 120
 119 121 Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на
 атоме водорода (δ), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров №
 Мономер - E_0 pK_a 1 1,2-(3,3'-диинденил) этана 270659 +0,07 32 2 3,3'-
 диинденила 240404 +0,07 32 Таким образом, нами впервые выполнен квантово-
 химический расчет молекулы 1,2-(3,3'-диинденил) этана и 3,3'-диинденила
 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное
 строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 32$.
 Установлено, что 1,2-(3,3'-диинденил)этан и 3,3'-диинденила относится к классу
 очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$).