

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 1,1'-диинденила и бромбутилиндена [1] методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PCGAMESS [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 1.1'-диинденила и бромбутилиндена 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 1.1'-диинденила ($E_0 = -240467$ кДж/моль, $E_{эл} = -1614269$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,1'-диинденила

электронное строение молекулы 1,1'-диинденила (E0= -240467 кДж/моль, Eэл= -1614269 кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,1'-диинденила																																							
Длины связей R,Å																																							
Валентные углы Град																																							
C(2)-C(1)	C(3)-C(1)	C(3)-C(9)	C(4)-C(2)	C(4)-C(6)	C(5)-C(3)	C(6)-C(5)	C(7)-C(5)	C(8)-C(7)	C(9)-C(8)	C(10)-C(7)	C(11)-C(10)	C(12)-C(10)	C(13)-C(12)	C(13)-C(14)	C(14)-C(11)	C(15)-C(11)	C(16)-C(15)	C(17)-C(16)	C(17)-C(18)	C(18)-C(14)	H(19)-C(9)	H(20)-C(8)	H(21)-C(1)	H(22)-C(2)	H(23)-C(4)	H(24)-C(6)	H(25)-C(15)	H(26)-C(16)	H(27)-C(17)	H(28)-C(18)	H(29)-C(13)	H(30)-C(12)	H(31)-C(10)	H(32)-C(7)	1,41				
1,40	1,47	1,40	1,41	1,44	1,40	1,53	1,53	1,36	1,55	1,53	1,53	1,36	1,47	1,44	1,40	1,41	1,40	1,41	1,40	1,08	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,08	1,08	1,12	1,12		
C(2)-C(1)-C(3)	C(8)-C(9)-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(3)-C(5)-C(7)	C(5)-C(7)-C(8)	C(7)-C(8)-C(9)	C(5)-C(7)-C(10)	C(7)-C(10)-C(11)	C(7)-C(10)-C(12)	C(10)-C(12)-C(13)	C(11)-C(14)-C(13)	C(10)-C(11)-C(14)	C(10)-C(11)-C(15)	C(11)-C(15)-C(16)	C(15)-C(16)-C(17)	C(14)-C(18)-C(17)	C(11)-C(14)-C(18)	C(8)-C(9)-H(19)	C(7)-C(8)-H(20)	C(2)-C(1)-H(21)	C(1)-C(2)-H(22)	C(2)-C(4)-H(23)	C(5)-C(6)-H(24)	C(11)-C(15)-H(25)	C(15)-C(16)-H(26)	C(16)-C(17)-H(27)	C(14)-C(18)-H(28)	C(12)-C(13)-H(29)	C(10)-C(12)-H(30)	C(7)-C(10)-H(31)	C(5)-C(7)-H(32)	119	110	121	119	121	120
109	102	112	117	118	113	112	108	109	131	119	121	119	121	127	122	120	119	120	122	122	119	120	121	127	121	108	107	122	122	119	120	121	127	121	108	107			

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы бромбутилиндена ($E_0 = -214014$ кДж/моль, $E_{эл} = -1202886$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бромбутилиндена

Длины связей R,Å	1,40	1,41	1,40	1,41	1,44	1,40	1,47	1,53	1,53	1,36	1,09	1,09	1,08	1,08	1,09	1,09	1,55	1,54	1,54	1,89	1,11	1,12	1,12	1,11	1,12	1,11	1,12	1,11	1,11	1,53	1,11	1,11																						
Валентные углы Град	C(2)-C(1)-C(3)	C(1)-C(2)-C(4)	C(3)-C(2)-C(4)	C(4)-C(2)-C(6)	C(5)-C(2)-C(6)	C(6)-C(2)-C(7)	C(7)-C(2)-C(8)	C(8)-C(2)-C(9)	C(9)-C(2)-C(7)	H(10)-C(3)-H(11)	H(12)-C(7)-H(13)	H(14)-C(6)-H(15)	C(16)-C(8)-C(17)	C(17)-C(8)-C(16)	Br(19)-C(27)-H(20)	H(21)-C(8)-H(22)	H(23)-C(17)-H(24)	H(25)-C(18)-H(26)	C(27)-C(18)-H(28)	H(29)-C(27)-H(30)	119	110	121	119	121	120	109	102	112	117	118	113	112	108	109	131	119	121	119	121	127	122	120	119	120	122	122	119	120	121	127	121	108	107

C(3)-C(4) C(5)-C(6)-C(4) C(1)-C(2)-C(5) C(2)-C(5)-C(6) C(1)-C(2)-C(7) C(2)-C(5)-C(8)
 C(7)-C(9)-C(8) C(2)-C(7)-C(9) C(1)-C(3)-H(10) C(2)-C(1)-H(11) C(2)-C(7)-H(12) C(7)-C(9)-
 H(13) C(5)-C(6)-H(14) C(3)-C(4)-H(15) C(5)-C(8)-C(16) C(8)-C(16)-C(17) C(16)-C(17)-
 C(18) C(17)-C(18)-Br(19) C(8)-C(16)-H(20) C(5)-C(8)-H(21) C(8)-C(16)-H(22) C(16)-
 C(17)-H(23) C(16)-C(17)-H(24) C(17)-C(18)-H(25) C(17)-C(18)-H(26) C(17)-C(18)-C(27)
 C(18)-C(27)-H(28) C(18)-C(27)-H(29) 119 121 119 121 120 131 109 112 110 119 121
 123 126 122 120 114 117 116 152 109 108 109 110 107 110 109 113 112 112

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 1,1'-диинденила 240467 +0,07 32 2 бромбутилиндена 214014
 +0,07 32 Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет
 молекулы 1,1'-диинденила и бромбутилиндена методом MNDO. Получено
 оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения.
 Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 32$. Установлено, что 1,1'-
 диинденил и бромбутилиндена относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$).