

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет производных диолов 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 молекул 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксанпентаол-1,1,5,7,7 и 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксантетраол-1,1,5,7,7 получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу  $pK_a = 42.11 - 147.18q_{\max H^+}$  [3], с успехом используемая, например, в работах [4-18] ( $q_{\max H^+} = +0,21; +0,19$  максимальные заряды на атомах водорода,  $pK_a$  универсальный показатель кислотности (см. табл. 1) находим значение кислотной силы равное  $pK_a = 13$ . Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксанпентаол-1,1,5,7,7 и 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксантетраол-1,1,5,7,7 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила  $pK_a = 11; 14$  соответственно. Установлено, что 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксанпентаол-1,1,5,7,7 и 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксантетраол-1,1,5,7,7 относятся к классу слабых H-кислот ( $pK_a = 14$ ). Рис. 1 Геометрическое и электронное строение молекулы 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол-трибороксанпентаол-1,1,5,7,7 ( $E_0 = -457309$  кДж/моль) Таблица 1 Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-силоксанолциклотриалюмоксандиол трибороксанпентаол-1,1,5,7,7

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Атом	Заряды на атомах молекулы	
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24	0.93 1.67 1.67 1.67 1.66 1.67 1.67 1.66 1.67 1.67 1.32 1.35 1.37 1.38 1.36 1.38 1.38 0.94 0.94 0.94 0.94 1.60 1.63 0.93	H(10)-O(9)-Al(6) O(9)-Al(6)-O(4) O(9)-Al(6)-O(8) Al(6)-O(4)-Al(1) O(4)-Al(1)-O(2) Al(1)-O(2)-Al(5) Al(6)-O(8)-Al(5) O(8)-Al(5)-O(2) O(8)-Al(5)-O(7) O(2)-Al(5)-O(7) Al(5)-O(7)-Si(24) O(4)-Al(1)-O(3) O(2)-Al(1)-O(3) O(13)-B(11)O(3) O(19)-B(15)-O(13) O(18)-B(15)-O(13) H(20)-O(19)-B(15) H(21)-O(18)-B(15) O(12)-B(11)-O(3) O(12)-B(14)-O(16) B(14)-O(16)-H(22) O(17)-B(14)-O(12) H(23)-O(17)-B(14) Si(24)-O(25)-H(26)	122 125 125 130 109 130 130 109 125 125 100 124 126 122 115 120 116 117 118 121 116 138 116 126 Al(1) O(2) O(3) O(4) Al(5) Al(6) O(7) O(8) O(9) H(10) B(11) O(12) O(13) B(14) B(15) O(16) O(17) O(18) O(19) H(20) H(21) H(22) H(23) Si(24) O(25) H(26)	1.15 -0.70 -0.48 -0.69 1.08 1.03 -0.83 -0.71 -0.53 0.19 0.39 -0.27 -0.26 0.25 0.25 -0.28 -0.27 -0.29 -0.27 0.19 0.20 0.21 0.19 0.94 -0.66 0.19 1H(10)-O(9), 2 O(9)-Al(6), 3Al(5)-O(8), 4Al(5)-O(2), 5 O(2)-Al(1), 6 Al(1)-O(4), 7 O(4)-Al(6), 8 Al(6)-O(4), 9 Al(6)-O(9), 10 Al(1)-O(3), 11 O(3)-B(11), 12 O(12)-B(14), 13

B(14)-O(17), 14 B(11)-O(13), 15 B(15)-O(13), 16 B(15)-O(18), 17 B(15)-O(19), 18  
 H(21)-O(18), 19 O(19)-H(20), 20 O(16)-H(22), 21 O(17)-H(23), 22 Si(24)-O(7), 23  
 Si(24)-O(25), 24 O(25)-H(26) Рис. 2 Геометрическое и электронное строение  
 молекулы 3-силоксанолциклотриалюмо-ксандиол-трибоксантетраол-  
 1,1,5,7,7( $E_0 = -273131$  кДж/моль) Таблица 2 Оптимизированные длины связей,  
 валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-  
 силоксанолциклотриалюмоксандиол трибоксантетраол-1,1,5,7,7 Дли ны свя зей  
 R,Å Валентные углы Град Атом Заря ды на ато мах моле кулы 1 2 3 4 5 6 7 0.93  
 0.93 1.67 1.67 1.67 1.67 1.67 H(10)-O(9)-Al(6) O(9)-Al(6)-O(4) O(9)-Al(6)-O(8) Al(6)-  
 O(4)-Al(1) O(4)-Al(1)-O(2) Al(1)-O(2)-Al(5) Al(6)-O(8)-Al(5) 122 125 125 130 109 130  
 130 Al(1) O(2) O(3) O(4) Al(5) Al(6) Al(7) 1.03 -0.70 -0.67 -0.68 1.00 1.00 -0.53 8 9 10  
 11 12 13 14 15 1.67 1.67 0.93 1.62 1.62 1.68 1.68 2.10 O(8)-Al(5)-O(2) O(8)-Al(5)-O(7)  
 O(2)-Al(5)-O(7) Al(5)-O(7)-H(10) O(4)-Al(1)-O(3) O(2)-Al(1)-O(3) O(3)-Al(15)-O(12) O(3)-  
 Al(15)-O(13) Al(15)-O(12)-Na(16) O(12)-Al(15)-O(13) H(14)-O(13)-Al(15) 109 125 125  
 122 124 126 123 112 169 123 117 O(8) O(9) H(10) O(11) O(12) H(13) H(14) Al(15)  
 Na(16) -0.69 -0.53 0.18 -0.54 -1.02 0.15 0.19 0.83 1.00 1O(9)-H(10), 2 O(7)-H(14), 3  
 Al(6)-O(9), 4 Al(6)-O(2), 5 Al(6)-Al(8), 6 Al(1)-O(2), 7 Al(15)-O(3), 8 Al(15)-O(12), 9  
 Al(15)-O(11), 10 H(14)-O(13), 11 Al(1)-O(4), 12 Al(5)-O(7), 13 -Al(5)-O(8), 14 Al(5)-O(2),  
 15 O(12)-Na(16) Таблица 3 Общая энергия( $E_0$ ), электронная энергия ( $E_{эл}$ ),  
 максимальный заряд на атоме водорода ( $q_{max}H^+$ ), универсальный показатель  
 кислотности ( $pK_a$ ) производных диолов мономеров катионной полимеризации №  
 Мономер  $-E_0$  кДж/ моль  $q_{max}H^+$   $pK_a$  1 3-силоксанолцикло триалюмоксандиол-  
 трибороксанпентаол1,1,5,7,7 -457309 +0,21 11 2 3-илоксанолцикло  
 триалюмоксандиол-трибороксанпентаол1,1,5,7,7 -273131 +0,19 14