

Несомненный интерес представляет собой рассмотрение ряда линейных гексогонов: бензола, дибензола, трибензола, тетрацена, пентацена, гексацена, гептацена, октацена, нонацена, декацена, эйкоцена, триконтацена, тетраконтацена, пентаконтацена, гектаконтацена и т.д. в качестве молекулярных моделей графенов, открытых Геймом и Новоселовым в 2004 году [1-2]. Изменение геометрических и энергетических характеристик в этом ряду и, в связи с этим, установление различных закономерностей в зависимости от количества гексогонов в модели, очевидно, является актуальным. Наиболее логично получать такие зависимости через квантово-химический расчет вышеперечисленных моделей графенов, и в, частности, методом MNDO. Расчет первых моделей в этом ряду, состоящих из 1,2,3,4 гексогонов этим методом были выполнены в работах [3-4]. В связи с этим, логично выполнить квантовохимический расчет моделей графенов, состоящих из 6 и 7 гексогонов т.е. гексацена и гептацена. Поэтому, целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул гексацена, гептацена методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом встроенным в PC GAMESS [5], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [6]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул гексацена, гептацена получено методом MNDO и показано на рис.1,2 и в табл.1-4. Применяя известную формулу [7-9]  $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{max}H^+$  (где  $q_{max}H^+ = +0.06$  - максимальный заряд на атоме водорода,  $pK_a$ - универсальный показатель кислотности), с успехом используемую, например в работах [8-18], находим значение кислотной силы этих соединений  $pK_a = 33$ .

Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы гексацена

| Длины связей R, Å | Валентные углы Град | Атом      | Заряды на атомах молекулы |           |           |           |           |           |            |             |            |            |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |             |                |                  |                |                 |                |                 |                |                |                |                 |                |                |                |                 |                   |                   |                 |                   |                  |                   |                   |
|-------------------|---------------------|-----------|---------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|-------------|------------|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|------------------|----------------|-----------------|----------------|-----------------|----------------|----------------|----------------|-----------------|----------------|----------------|----------------|-----------------|-------------------|-------------------|-----------------|-------------------|------------------|-------------------|-------------------|
| C(1)-C(2)         | C(2)-C(3)           | C(3)-C(4) | C(4)-C(5)                 | C(5)-C(6) | C(6)-C(1) | H(7)-C(3) | H(8)-C(4) | H(9)-C(5) | H(10)-C(6) | C(11)-C(14) | C(11)-C(1) | C(12)-C(2) | C(13)-C(12) | C(14)-C(13) | H(15)-C(12) | H(16)-C(11) | C(17)-C(18) | C(17)-C(14) | C(18)-C(19) | C(19)-C(20) | C(20)-C(13) | H(21)-C(17) | H(22)-C(20) | C(23)-C(24) | C(23)-C(18) | C(24)-C(25) | C(25)-C(26) | C(26)-C(19) | H(27)-C(26) | H(28)-C(23) | C(29)-C(32) | C(29)-C(24) | C(30)-C(25) | C(31)-C(30) | C(32)-C(31) | H(33)-C(29) | H(34)-C(30) | C(35)-C(31) | C(36)-C(35) | C(37)-C(38) | C(37)-C(32) | C(38)-C(36) | H(39)-C(37) | H(40)-C(35) | H(41)-C(36) | H(42)-C(38) |                |                  |                |                 |                |                 |                |                |                |                 |                |                |                |                 |                   |                   |                 |                   |                  |                   |                   |
| 1.47              | 1.46                | 1.36      | 1.45                      | 1.36      | 1.46      | 1.09      | 1.09      | 1.09      | 1.09       | 1.45        | 1.38       | 1.38       | 1.45        | 1.45        | 1.09        | 1.09        | 1.43        | 1.40        | 1.45        | 1.43        | 1.40        | 1.09        | 1.09        | 1.40        | 1.43        | 1.45        | 1.40        | 1.43        | 1.09        | 1.09        | 1.38        | 1.45        | 1.45        | 1.38        | 1.47        | 1.09        | 1.09        | 1.46        | 1.36        | 1.36        | 1.46        | 1.45        | 1.09        | 1.09        | 1.09        | 1.09        | C(3)-C(2)-C(1) | C(14)-C(11)-C(1) | C(4)-C(3)-C(2) | C(11)-C(1)-C(2) | C(5)-C(4)-C(3) | C(12)-C(2)-C(3) | C(6)-C(5)-C(4) | C(1)-C(6)-C(5) | C(2)-C(1)-C(6) | C(11)-C(1)-C(6) | C(4)-C(3)-H(7) | C(5)-C(4)-H(8) | C(6)-C(5)-H(9) | C(1)-C(6)-H(10) | C(13)-C(14)-C(11) | C(17)-C(14)-C(11) | C(1)-C(2)-C(12) | C(20)-C(13)-C(12) | C(2)-C(12)-C(13) | C(17)-C(14)-C(13) | C(12)-C(13)-C(14) |

C(18)-C(17)-C(14) C(2)-C(12)-H(15) C(14)-C(11)-H(16) C(19)-C(18)-C(17) C(23)-C(18)-C(17) C(20)-C(19)-C(18) C(24)-C(23)-C(18) C(13)-C(20)-C(19) C(23)-C(18)-C(19) C(14)-C(13)-C(20) C(26)-C(19)-C(20) C(18)-C(17)-H(21) C(13)-C(20)-H(22) C(25)-C(24)-C(23) C(29)-C(24)-C(23) C(26)-C(25)-C(24) C(32)-C(29)-C(24) C(19)-C(26)-C(25) C(29)-C(24)-C(25) C(18)-C(19)-C(26) C(30)-C(25)-C(26) C(19)-C(26)-H(27) C(24)-C(23)-H(28) C(31)-C(32)-C(29) C(37)-C(32)-C(29) C(24)-C(25)-C(30) C(35)-C(31)-C(30) C(25)-C(30)-C(31) C(37)-C(32)-C(31) C(30)-C(31)-C(32) C(38)-C(37)-C(32) C(32)-C(29)-H(33) C(25)-C(30)-H(34) C(32)-C(31)-C(35) C(31)-C(35)-C(36) C(36)-C(38)-C(37) C(35)-C(36)-C(38) C(38)-C(37)-H(39) C(31)-C(35)-H(40) C(35)-C(36)-H(41) C(36)-C(38)-H(42) 118 122 121 119 120 123 120 121 118 123 120 118 121 118 118 123 119 123 122 119 118 122 120 118 119 122 119 122 122 119 119 122 118 119 119 123 119 123 122 118 119 123 118 119 119 123 118 123 122 118 119 122 120 118 118 122 120 120 120 118 121 118 C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6) H(7) H(8) H(9) H(10) C(11) C(12) C(13) C(14) H(15) H(16) C(17) C(18) C(19) C(20) H(21) H(22) C(23) C(24) C(25) C(26) H(27) H(28) C(29) C(30) C(31) C(32) H(33) H(34) C(35) C(36) C(37) C(38) H(39) H(40) H(41) H(42) -0.04 -0.04 -0.04 -0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.04 -0.06 -0.04 -0.06 0.06 0.06 0.06 0.06 0.06 Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы гексацена. (E0= -342148 кДж/моль, Eэл= -2523258 кДж/моль) Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы гептацена. (E0= -394138 кДж/моль, Eэл= -3072550 кДж/моль) Таблица 2 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах гептацена

| Длины связей R, А                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Валентные углы Град | Атом | Заряды на атомах молекулы |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|------|---------------------------|
| C(1)-C(2) C(2)-C(3) C(3)-C(4) C(4)-C(5) C(5)-C(6) C(6)-C(1) H(7)-C(3) H(8)-C(4) H(9)-C(5) H(10)-C(6) C(11)-C(14) C(11)-C(1) C(12)-C(2) C(13)-C(12) C(14)-C(13) H(15)-C(12) H(16)-C(11) C(17)-C(18) C(17)-C(14) C(18)-C(19) C(19)-C(20) C(20)-C(13) H(21)-C(17) H(22)-C(20) C(23)-C(24) C(23)-C(18) C(24)-C(25) C(25)-C(26) C(26)-C(19) H(27)-C(26) H(28)-C(23) C(29)-C(32) C(29)-C(24) C(30)-C(25) C(31)-C(30) C(32)-C(31) H(33)-C(29) H(34)-C(30) C(35)-C(31) C(36)-C(35) C(37)-C(38) C(37)-C(32) C(38)-C(36) H(39)-C(37) H(40)-C(35) C(41)-C(42) C(41)-C(38) C(42)-C(43) C(43)-C(44) C(44)-C(36) H(45)-C(44) H(46)-C(43) H(47)-C(42) H(48)-C(41) 1.47 1.46 1.36 1.45 1.36 1.46 1.09 1.09 1.09 1.45 1.38 1.38 1.45 1.46 1.09 1.09 1.44 1.39 1.45 1.44 1.39 1.09 1.09 1.41 1.41 1.45 1.41 1.41 1.09 1.09 1.39 1.44 1.44 1.39 1.46 1.09 1.09 1.45 1.38 1.38 1.45 1.47 1.09 1.09 1.36 1.46 1.45 1.36 1.46 1.09 1.09 1.09 1.09 C(3)-C(2)-C(1) C(14)-C(11)-C(1) C(4)-C(3)-C(2) C(11)-C(1)-C(2) C(5)-C(4)-C(3) C(12)-C(2)-C(3) C(6)-C(5)-C(4) C(1)-C(6)-C(5) C(2)-C(1)-C(6) C(11)-C(1)-C(6) C(4)-C(3)-H(7) C(5)-C(4)-H(8) C(6)-C(5)-H(9) C(1)-C(6)-H(10) C(13)-C(14)-C(11) C(17)-C(14)-C(11) C(1)-C(2)-C(12) C(20)-C(13)-C(12) C(2)-C(12)-C(13) C(17)-C(14)-C(13) C(12)-C(13)-C(14) C(18)-C(17)-C(14) C(2)-C(12)-H(15) C(14)-C(11)-H(16) C(19)-C(18)-C(17) C(23)-C(18)-C(17) C(20)-C(19)-C(18) C(24)-C(23)-C(18) C(13)-C(20)-C(19) C(23)-C(18)-C(19) C(14)-C(13)-C(20) C(26)-C(19)-C(20) C(18)-C(17)-H(21) C(13)-C(20)-H(22) C(25)-C(24)-C(23) C(29)-C(24)-C(23) C(26)- |                     |      |                           |

C(25)-C(24) C(32)-C(29)-C(24) C(19)-C(26)-C(25) C(29)-C(24)-C(25) C(18)-C(19)-C(26)  
 C(30)-C(25)-C(26) C(19)-C(26)-H(27) C(24)-C(23)-H(28) C(31)-C(32)-C(29) C(37)-C(32)-  
 C(29) C(24)-C(25)-C(30) C(35)-C(31)-C(30) C(25)-C(30)-C(31) C(37)-C(32)-C(31) C(30)-  
 C(31)-C(32) C(38)-C(37)-C(32) C(32)-C(29)-H(33) C(25)-C(30)-H(34) C(32)-C(31)-C(35)  
 C(44)-C(36)-C(35) C(31)-C(35)-C(36) C(41)-C(38)-C(36) C(36)-C(38)-C(37) C(41)-C(38)-  
 C(37) C(35)-C(36)-C(38) C(42)-C(41)-C(38) C(38)-C(37)-H(39) C(31)-C(35)-H(40) C(43)-  
 C(42)-C(41) C(44)-C(43)-C(42) C(36)-C(44)-C(43) C(38)-C(36)-C(44) C(36)-C(44)-H(45)  
 C(44)-C(43)-H(46) C(43)-C(42)-H(47) C(42)-C(41)-H(48) 118 122 122 119 121 123 121  
 122 118 123 120 118 121 118 118 123 119 123 122 119 118 122 120 118 119 123  
 119 122 122 119 119 123 118 120 119 123 119 122 122 118 119 123 119 119 119  
 123 118 123 122 118 119 122 120 118 118 123 122 118 119 123 119 122 120 117  
 121 121 122 118 118 121 118 120 C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6) H(7) H(8) H(9) H(10)  
 C(11) C(12) C(13) C(14) H(15) H(16) C(17) C(18) C(19) C(20) H(21) H(22) C(23) C(24)  
 C(25) C(26) H(27) H(28) C(29) C(30) C(31) C(32) H(33) H(34) C(35) C(36) C(37) C(38)  
 H(39) H(40) C(41) C(42) C(43) C(44) H(45) H(46) H(47) H(48) -0.04 -0.04 -0.04 -0.06 -  
 0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02  
 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.02 -  
 0.04 -0.02 -0.04 0.06 0.06 -0.04 -0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 Таблица 3 -  
 Общая энергия(E0), электронная энергия (Еэл), максимальный заряд на атоме  
 водорода (qmaxH+), универсальный показатель кислотности (pKa) молекул  
 гексацена, гептацена № Молекулы -E0 кДж/моль qmaxH+ pKa 1 гексацена -  
 342148 +0.06 33 2 гексацена -394138 +0.06 33 Таким образом, нами впервые  
 выполнен квантово-химический расчет молекул гексацена, гептацена методом  
 MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение  
 этих соединения. Теоретически оценена их кислотная сила pKa=33.  
 Установлено, что молекулы этих графенов обладают одинаковой кислотной  
 силой и относится к классу очень слабых Н-кислот (pKa>14).