

Цель и методическая часть работы Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул (3-силоксанолциклотриалюмоксандиолтрибороксантетраол-1,1,5,5; 3-силоксанолциклотриалюмоксан-диолтетрабороксанпентаол-1,1,5,7,7 и 3-силоксанолциклотриалюмоксандиолпентабороксангексаол-1,1,5,7,9,9) методом MNDO в рамках молекулярной модели с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка их кислотной силы. Данные соединения могут являться фрагментами классических моделей оптического стекла, таких как «лёгкий крон», «тяжёлый флинт» и др., как в рамках полимерной модели Менделеева, так и в рамках современной тетраэдрических моделей [1]. Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул трибороалюмоксандиолов получены методом MNDO и показаны на рис.1-3 и в табл.1-4. Применяя известную формулу $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{max} H^+$ [4] ($q_{max} H^+ = +0.21 - 0.22$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1), которая с успехом используется, например, в работах [5-10], находим значение кислотной силы, равное $pK_a = 10-11$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 3-силоксанолциклотриалюмоксандиолтриборо-ксантетраол-1,1,5,5; 3-силоксанолциклотри-алюмоксандиолтетрабороксанпентаол-1,1,5,7,7 и 3-силоксанолциклотриалюмоксандиолпентаборо-ксангексаол-1,1,5,7,9,9 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 10-11$. Установлено, что трибороалюмо-ксандиолы обладают одинаковой кислотной силой, и относятся к классу слабых H-кислот ($pK_a \approx 11$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 3-силоксанолциклотриалюмо-ксандиолтрибороксантетраол-1,1,5,5. ($E_0 = -457325$ kDg/mol, $E_{эл} = -2111101$ kDg/mol) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-силоксанолциклотриалюмо-ксандиолтрибороксантетраол-1,1,5,5

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	В(2)-O(5)	В(3)-O(5)-B(2)	В(3)-B(2)	O(5)-B(2)-B(3)	O(4)-B(1)	В(2)-B(3)-O(5)	O(5)-B(3)	O(4)-B(1)-O(6)	O(6)-B(1)	O(4)-B(1)-O(7)	O(7)-B(1)	В(2)-B(3)-O(8)	O(8)-B(3)	В(2)-B(3)-O(9)	O(9)-B(3)	O(5)-B(2)-O(10)	O(10)-B(2)	В(2)-O(10)-AL(11)	AL(11)-O(10)	O(10)-AL(11)-O(12)	O(12)-AL(11)	O(10)-AL(11)-O(13)	O(13)-AL(11)	AL(11)-O(12)-AL(14)	AL(14)-O(12)	AL(11)-O(13)-AL(15)	AL(15)-O(13)	O(13)-AL(15)-O(16)	O(16)-AL(15)	O(13)-AL(15)-O(17)	O(17)-AL(15)	O(12)-AL(14)-O(18)	O(18)-AL(14)	AL(14)-O(18)-SI(19)	SI(19)-O(18)	O(18)-SI(19)-O(20)
1.38	138	2.55	21	1.36	21	1.36	121	1.37	119	1.38	133	1.38	101	1.38	122	1.32	154	1.66	124	1.66	127	1.66	131	1.67	131	1.67	110	1.67	125	1.67	126	1.63	172	1.60	99		

O(20)-Si(19) 1.64 B(1)-O(7)-H(21) 117 H(21)-O(7) 0.94 B(1)-O(6)-H(22) 116 H(22)-O(6) 0.94 B(3)-O(9)-H(23) 117 H(23)-O(9) 0.94 B(3)-O(8)-H(24) 116 H(24)-O(8) 0.94 Si(19)-O(20)-H(25) 123 H(25)-O(20) 0.93 Al(15)-O(17)-H(26) 122 H(26)-O(17) 0.93 Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 3-

силоксанолциклотриалюмоксандиолтетрабороксанпентаол-1,1,5,7,7. ($E_0 = -528008$ kDg/mol, $E_{эл} = -2627625$ kDg/mol) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-

силоксанолциклотриалюмоксандиолтетрабороксанпентаол-1,1,5,7,7 Длины связей R, Å Валентные углы Град B(2)-O(5) 1.38 B(3)-O(5)-B(2) 137 B(3)-B(2) 2.55 O(5)-B(2)-B(3) 21 O(4)-B(1) 1.36 B(2)-B(3)-O(5) 21 O(5)-B(3) 1.36 O(4)-B(1)-O(6) 121 O(6)-B(1) 1.37 O(4)-B(1)-O(7) 119 O(7)-B(1) 1.37 B(2)-B(3)-O(8) 101 O(8)-B(3) 1.37 B(2)-B(3)-O(9) 140 O(9)-B(3) 1.37 O(5)-B(2)-O(10) 123 O(10)-B(2) 1.32 B(2)-O(10)-Al(11) 156 Al(11)-O(10) 1.66 O(10)-Al(11)-O(12) 124 O(12)-Al(11) 1.66 O(10)-Al(11)-O(13) 126 O(13)-Al(11) 1.66 Al(15)-O(16)-Al(14) 131 Al(14)-O(16) 1.67 Al(11)-O(13)-Al(15) 130 Al(15)-O(13) 1.67 O(13)-Al(15)-O(16) 110 O(16)-Al(15) 1.67 O(13)-Al(15)-O(17) 125 O(17)-Al(15) 1.67 O(16)-Al(14)-O(18) 125 O(18)-Al(14) 1.63 Al(14)-O(18)-Si(19) 172 Si(19)-O(18) 1.60 O(18)-Si(19)-O(20) 99 O(20)-Si(19) 1.64 B(1)-O(7)-H(21) 117 H(21)-O(7) 0.94 B(1)-O(6)-H(22) 116 H(22)-O(6) 0.94 B(3)-O(8)-H(23) 116 H(23)-O(8) 0.94 Si(19)-O(20)-H(24) 123 H(24)-O(20) 0.93 Al(15)-O(17)-H(25) 122 H(25)-O(17) 0.93 B(3)-O(9)-B(26) 139 B(26)-O(9) 1.38 O(9)-B(26)-O(27) 118 O(27)-B(26) 1.37 O(9)-B(26)-O(28) 126 O(28)-B(26) 1.36 B(26)-O(28)-H(29) 117 H(29)-O(28) 0.94 B(26)-O(27)-H(30) 116 H(30)-O(27) 0.94 Рис. 3 - Геометрическое и электронное строение молекулы 3-силоксанолциклотри-алюмоксандиолпентабороксангексаол-1,1,5,7,9,9. ($E_0 = -598673$ kDg/mol, $E_{эл} = -3159597$ kDg/mol) Таблица 3 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-силоксанолциклотриалюмоксандиолтри-бороксангексаол- 1, 1, 5, 7, 9,9 Длины связей R, Å Валентные углы Град B(2)-O(5) 1.38 B(3)-O(5)-B(2) 138 B(3)-B(2) 2.55 O(5)-B(2)-B(3) 21 O(4)-B(1) 1.36 B(2)-B(3)-O(5) 21 O(5)-B(3) 1.36 O(4)-B(1)-O(6) 121 O(6)-B(1) 1.37 O(4)-B(1)-O(7) 119 O(7)-B(1) 1.37 B(2)-B(3)-O(8) 101 O(8)-B(3) 1.37 B(2)-B(3)-O(9) 140 O(9)-B(3) 1.38 O(5)-B(2)-O(10) 123 O(10)-B(2) 1.32 B(2)-O(10)-Al(11) 157 Al(11)-O(10) 1.66 O(10)-Al(11)-O(12) 125 O(12)-Al(11) 1.66 O(10)-Al(11)-O(13) 125 O(13)-Al(11) 1.66 Al(11)-O(12)-Al(14) 131 Al(14)-O(12) 1.67 Al(11)-O(13)-Al(15) 130 Al(15)-O(13) 1.67 O(13)-Al(15)-O(16) 110 O(16)-Al(15) 1.67 O(13)-Al(15)-O(17) 125 O(17)-Al(15) 1.67 O(12)-Al(14)-O(18) 126 O(18)-Al(14) 1.63 Al(14)-O(18)-Si(19) 171 Si(19)-O(18) 1.60 O(18)-Si(19)-O(20) 99 O(20)-Si(19) 1.64 B(1)-O(7)-H(21) 117 H(21)-O(7) 0.94 B(1)-O(6)-H(22) 116 H(22)-O(6) 0.94 B(3)-O(8)-H(23) 117 H(23)-O(8) 0.94 Si(19)-O(20)-H(24) 123 H(24)-O(20) 0.93 Al(15)-O(17)-H(25) 122 H(25)-O(17) 0.93 B(3)-O(9)-B(26) 138 B(26)-O(9) 1.36 O(9)-B(26)-O(27) 120 O(27)-B(26) 1.38 O(9)-B(26)-O(28) 121 O(28)-B(26) 1.37 B(26)-O(28)-H(29) 117 H(29)-O(28) 0.94 B(26)-O(27)-B(30) 137 B(30)-O(27) 1.37 O(27)-B(30)-O(31) 119 O(31)-B(30) 1.37 O(27)-B(30)-O(32) 121 O(32)-B(30) 1.37 B(30)-O(32)-H(33) 116 H(33)-O(32) 0.95 B(30)-

O(31)-H(34) 117 H(34)-O(31) 0.94 Таблица 4 - Общая энергия (E0), электронная энергия (Еэл), максимальный заряд на атоме водорода (qmaxH+) и универсальный показатель кислотности (pKa) молекул трибороалюмоксандиолов
 Трибороалюмоксандиол -E0 (kDg/ mol) -Еэл (kDg/ mol) qmaxH+ pKa 3-силоксанол-циклотриалюмоксандиолтрибороксантаол-1,1,5,5 457325 2111101 0.21 11 3-силоксанол-циклотриалюмоксандиолтетрабороксанпентаол-1,1,5,7,7 528008 2627625 0.22 10 3-силоксанол-циклотриалюмоксандиолпентабороксангексаол-1,1,5,7,9,9 598673 3159597 0.22 10