

Введение Графен - двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом, находящихся в sp^2 -гибридизации и соединённых посредством σ - и π -связей в гексагональную двумерную кристаллическую решётку. Его можно представить как одну плоскость графита, отделённую от объёмного кристалла. По оценкам, графен обладает большой механической жёсткостью и рекордно большой теплопроводностью (~ 1 ТПа и $\sim 5 \cdot 10^3$ Вт $\cdot$ м $^{-1}$ ·К $^{-1}$ соответственно) [1]. Высокая подвижность носителей заряда (максимальная подвижность электронов среди всех известных материалов) делает его перспективным материалом для использования в самых различных приложениях, в частности, как будущую основу нанoeлектроники [2] и возможную замену кремния в интегральных микросхемах [3]. Несмотря на открытие графенов еще в 2004 Геймом и Новоселовым [4] до сих пор квантовохимические расчеты методом AB INITIO даже линейных графенов в 1,2,3,4,5,6 и т.д. гексогонов в рамках молекулярных моделей не выполнялись, что несомненно представляет интерес с точки зрения получения новых закономерностей на электронном наноуровне в изучаемых объектах. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул нафталина и антрацена [5] методом AB INITIO в базисе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [6], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка их кислотной силы, как первого шага в изучении вышеотмечавшихся закономерностей. Для визуального представления модели молекул использовалась известная программа MacMolPlt [7]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул нафталина и антрацена получены методом AB INITIO в базисе 6-311G** и показаны на рис.1, 2 и в табл.1-3. Применяя известную формулу $pK_a = 49.04 - 134.61 q_{maxH^+}$ [8], с успехом используемую, например, в работах [9-10], ($q_{maxH^+} = +0.09$ и $+0.1$ - максимальные заряды на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1) находим значения кислотной силы равные $pK_a = 37$ и 36 соответственно. Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы нафталина

Длины связей R, А	Валентные углы Град
C(2)-C(1) 1.41 C(5)-C(6)-C(1) 121 C(3)-C(2) 1.42 C(1)-C(2)-C(3) 119 C(4)-C(3) 1.36	C(12)-C(2)-C(3) 122 C(5)-C(4) 1.42 C(2)-C(3)-C(4) 121 C(6)-C(5) 1.36 C(3)-C(4)-C(5) 120
C(6)-C(1) 1.42 C(4)-C(5)-C(6) 120 H(7)-C(3) 1.08 C(2)-C(1)-C(6) 119 H(8)-C(4) 1.08	C(2)-C(3)-H(7) 119 H(9)-C(5) 1.08 C(3)-C(4)-H(8) 120 H(10)-C(6) 1.08 C(4)-C(5)-H(9) 120
C(11)-C(1) 1.42 C(5)-C(6)-H(10) 120 C(12)-C(2) 1.42 C(1)-C(6)-H(10) 119 C(13)-C(12) 1.36	C(2)-C(1)-C(11) 119 C(13)-C(14) 1.42 C(1)-C(2)-C(12) 119 C(14)-C(11) 1.36
C(14)-C(13)-C(12) 120 H(15)-C(12) 1.08 C(2)-C(12)-C(13) 121 H(16)-C(13) 1.08 C(11)-C(14)-C(13) 120	H(17)-C(14) 1.08 C(1)-C(11)-C(14) 121 H(18)-C(11) 1.08 C(2)-C(12)-H(15) 119
C(12)-C(13)-H(16) 120 C(14)-C(13)-H(16) 120 C(11)-C(14)-H(17) 120 C(1)-C(11)-C(14)-H(17) 120	

С(11)-Н(18) 119 Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы нафталина. ($E_0 = -1006514$ кДж/моль, $E_{эл} = -2215545$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы антрацена. Длины связей R, Å Валентные углы Град

С(2)-С(1) 1.42 С(5)-С(6)-С(1) 121 С(3)-С(2) 1.44 С(1)-С(2)-С(3) 119 С(4)-С(3) 1.35 С(12)-С(2)-С(3) 122 С(5)-С(4) 1.43 С(2)-С(3)-С(4) 121 С(6)-С(5) 1.35 С(3)-С(4)-С(5) 120 С(6)-С(1) 1.44 С(4)-С(5)-С(6) 120 Н(7)-С(3) 1.08 С(2)-С(1)-С(6) 119 Н(8)-С(4) 1.08 С(2)-С(3)-Н(7) 119 Н(9)-С(5) 1.08 С(3)-С(4)-Н(8) 120 Н(10)-С(6) 1.08 С(4)-С(5)-Н(9) 119 С(11)-С(1) 1.39 С(5)-С(6)-Н(10) 121 С(12)-С(2) 1.39 С(1)-С(6)-Н(10) 119 С(13)-С(12) 1.39 С(2)-С(1)-С(11) 119 С(13)-С(14) 1.42 С(1)-С(2)-С(12) 119 С(13)-С(20) 1.44 С(14)-С(13)-С(12) 119 С(14)-С(11) 1.39 С(20)-С(13)-С(12) 122 Н(15)-С(12) 1.08 С(2)-С(12)-С(13) 121 Н(16)-С(11) 1.08 С(11)-С(14)-С(13) 119 С(17)-С(14) 1.44 С(19)-С(20)-С(13) 121 С(18)-С(17) 1.35 С(17)-С(14)-С(13) 119 С(19)-С(18) 1.43 С(1)-С(11)-С(14) 121 С(20)-С(19) 1.35 С(20)-С(13)-С(14) 119 Н(21)-С(17) 1.08 С(2)-С(12)-Н(15) 119 Н(22)-С(18) 1.08 С(1)-С(11)-Н(16) 119 Н(23)-С(19) 1.08 С(11)-С(14)-С(17) 122 Н(24)-С(20) 1.08 С(14)-С(17)-С(18) 121 С(17)-С(18)-С(19) 120 С(18)-С(19)-С(20) 120 С(14)-С(17)-Н(21) 119 С(17)-С(18)-Н(22) 120 С(18)-С(19)-Н(23) 119 С(19)-С(20)-Н(24) 121

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы антрацена. ($E_0 = -1407281$ кДж/моль, $E_{эл} = -3430187$ кДж/моль) Таблица 3 - Общая энергия (E_0), электронная энергия ($E_{эл}$), максимальный заряд на атоме водорода ($q_{\max H^+}$) и универсальный показатель кислотности (pK_a) молекул Мономер - E_0 (кДж/моль) - $E_{эл}$ (кДж/моль) $q_{\max H^+}$ pK_a Нафталин 1006514 2215545 +0,09 37 Антрацен 1407281 3430187 +0,1 36

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул нафталина и антрацена методом AB INITIO в базисе 6-311G**. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила, $pK_a = 37$ и 36 . Установлено, что нафталин и антрацен относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Кроме того, необходимо отметить, что полученные результаты весьма близки расчетам, выполненным методом MNDO [5].