

В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, В. Д. Шестёркин,
О. В. Стоянов, Г. Е. Заиков

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ П-МЕТОКСИАЛЛИЛБЕНЗОЛА И 3-ФЕНИЛБУТЕНА-1 МЕТОДОМ AB INITIO

Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод AB INITIO, п-метоксиаллилбензол и 3-фенилбутен-1, кислотная сила.

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекул п-метоксиаллилбензола и 3-фенилбутен-1 методом AB INITIO в базисе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила ($pK_a = 34$). Установлено, что молекула п-метоксиаллилбензола и 3-фенилбутена-1 относится к классу очень слабых кислот ($pK_a > 14$)

Keywords: quantum chemical calculation, method AB INITIO, p-methoxiallylbenzol and 3-phenylbutene-1, acid strength.

For the first time it is executed quantum chemical calculation of the molecules of p-methoxiallylbenzol and 3-phenylbutene-1 method AB INITIO with optimization of geometry on all parameters. The optimized geometrical and electronic structure of this connection is received. Acid force of p-methoxiallylbenzol and 3-phenylbutene-1 is theoretically appreciated. It is established, than it to relate to a class of very weak H-acids ($pK_a = +34$, where pK_a -universal index of acidity).

Введение

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул п-метоксиаллилбензола [1] и 3-фенилбутена-1 методом AB INITIO в базисе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [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 молекул п-метоксиаллилбензола и 3-фенилбутена-1 получена методом AB INITIO в базисе 6-311G** и показаны на рис.1-2 и в табл.1-2.

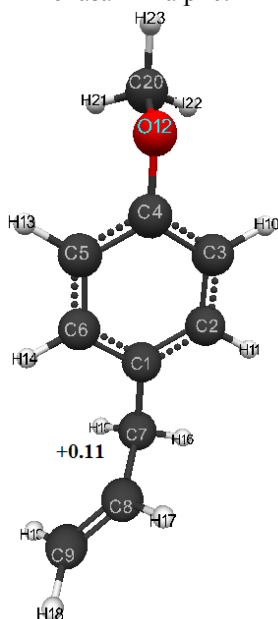


Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы п-метоксиаллилбензола
($E_0 = -1207173$ кДж/моль, $E_{эл} = -2685566$ кДж/моль)

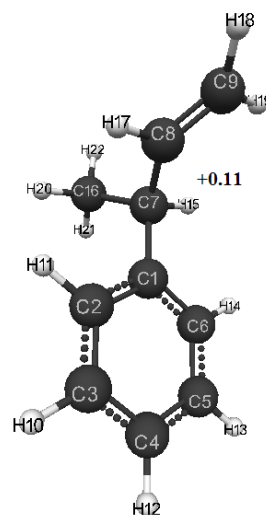


Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 3-фенилбутена-1
($E_0 = -1010963$ кДж/моль, $E_{эл} = -2278054$ кДж/моль)

Используя известную формулу $pK_a = 49,04 - 134,61q_{\max}^{H^+}$ [4] ($q_{\max}^{H^+} = +0,11$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности) которая с успехом используется, например, в работах [5-9], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 34$.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул п-метоксиаллилбензола и 3-фенилбутена-1 методом AB INITIO в базисе 6-311G**. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 34$. Установлено, что п-метоксиаллилбензол и 3-фенилбутен-1 относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$).

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

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град
C(2)-C(1)	1,39	C(1)-C(2)-C(3)	121
C(3)-C(2)	1,39	C(2)-C(3)-C(4)	120
C(4)-C(3)	1,38	C(3)-C(4)-C(5)	120
C(5)-C(4)	1,39	C(4)-C(5)-C(6)	120
C(6)-C(5)	1,38	C(2)-C(1)-C(7)	121
C(7)-C(1)	1,52	C(1)-C(7)-C(8)	113
C(8)-C(7)	1,51	C(7)-C(8)-C(9)	125
C(9)-C(8)	1,32	C(2)-C(3)-H(10)	121
H(10)-C(3)	1,08	C(1)-C(2)-H(11)	120
H(11)-C(2)	1,08	C(3)-C(4)-O(12)	120
O(12)-C(4)	1,36	C(4)-C(5)-H(13)	119
H(13)-C(5)	1,08	C(5)-C(6)-H(14)	119
H(14)-C(6)	1,08	C(1)-C(7)-H(15)	110
H(15)-C(7)	1,09	C(1)-C(7)-H(16)	109
H(16)-C(7)	1,09	C(7)-C(8)-H(17)	116
H(17)-C(8)	1,08	C(8)-C(9)-H(18)	121
H(18)-C(9)	1,08	C(8)-C(9)-H(19)	122
H(19)-C(9)	1,08	C(4)-O(12)-C(20)	116
C(20)-O(12)	1,41	O(12)-C(20)-H(21)	111
H(21)-C(20)	1,09	O(12)-C(20)-H(22)	111
H(22)-C(20)	1,09	O(12)-C(20)-H(23)	107
H(23)-C(20)	1,08		

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 3-фенилбутена-1

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град
C(2)-C(1)	1,39	C(1)-C(2)-C(3)	121
C(3)-C(2)	1,38	C(2)-C(3)-C(4)	120
C(4)-C(3)	1,39	C(3)-C(4)-C(5)	119
C(5)-C(4)	1,38	C(4)-C(5)-C(6)	120
C(6)-C(5)	1,39	C(2)-C(1)-C(7)	122
C(7)-C(1)	1,52	C(1)-C(7)-C(8)	112
C(8)-C(7)	1,51	C(7)-C(8)-C(9)	125
C(9)-C(8)	1,32	C(2)-C(3)-H(10)	120
H(10)-C(3)	1,08	C(1)-C(2)-H(11)	120
H(11)-C(2)	1,08	C(3)-C(4)-H(12)	120
H(12)-C(4)	1,08	C(4)-C(5)-H(13)	120
H(13)-C(5)	1,08	C(5)-C(6)-H(14)	119
H(14)-C(6)	1,08	C(1)-C(7)-H(15)	107
H(15)-C(7)	1,09	C(1)-C(7)-C(16)	112
C(16)-C(7)	1,54	C(7)-C(8)-H(17)	116
H(17)-C(8)	1,08	C(8)-C(9)-H(18)	121
H(18)-C(9)	1,08	C(8)-C(9)-H(19)	122
H(19)-C(9)	1,08	C(7)-C(16)-H(20)	111
H(20)-C(16)	1,09	C(7)-C(16)-H(21)	111
H(21)-C(16)	1,09	C(7)-C(16)-H(22)	110
H(22)-C(16)	1,09		

Литература

1. Дж Кеннеди. *Катионная полимеризация олефинов*. Изд-во «Мир»– М., 1978. – 431 с.
2. M.W. Shmidt, K.K. Baldrosge, J.A. Elbert, M.S. Gordon, and anothers General Atomic and Molecular Electronic Structure Systems. *J. Comput. Chem.* №14. P. 1347-1363, 1993
3. B.M. Bode and M.S. Gordon. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. *J. Molec. Graphics.* №16. P. 133-138, 1998.
4. V.A. Babkin, R.G. Fedunov, K.S. Minsker. and anothers. Oxidation communication, 2002, №1, 25, 21-47.
5. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, О. В. Савченко, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[3, 1, 0]гексана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 109-110, 2012
6. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, О. В. Савченко, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков Квантово-химический расчет молекулы бицикло[4, 1, 0]гептана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 111-112, 2012
7. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, С. Е. Карпушова, С. Н. Русанова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[5, 1, 0]октана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 113-114, 2012
8. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, В. Ю. Дмитриев, Н. Е. Темникова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[6, 1, 0]нонана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 115-116, 2012
9. В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, В. Ю. Дмитриев, Л. Е. Кузнецова, Г. Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы бицикло[10, 1, 0]тридекана методом АВ INITIO. *Вестн. Казан. технол. ун-та.* Т. 15, №13, с. 117-118, 2012

