УДК 547.64:544.183.25

В. А. Бабкин, В. В. Трифонов, Н. Г. Лебедев, В. Ю. Дмитриев,
Д. С. Андреев, О. В. Стоянов, Г. Е. Заиков

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ НАФТАЛИНА И АНТРАЦЕНА МЕТОДОМ MNDO В ПРИБЛИЖЕНИИ ЛИНЕЙНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МОДЕЛИ ГРАФЕНА

Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод MNDO, нафталин, антрацен, кислотная сила.

Впервые выполнен квантово-химический расчет молекул нафталина, антрацена методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила (pKa=33). Установлено, что эти близкие к графену соединения, относятся к классу очень слабых кислот (pKa>14).

Keywords: quantum chemical calculation, method MNDO, naphthalene, anthracene, acid strength.

For the first time it is executed quantum chemical calculation of a molecule of naphthalene, anthracene method MNDO with optimization of geometry on all parameters. The optimized geometrical and electronic structure of this connection is received. Acid force of these molecules is theoretically appreciated. It is established, that it to relate to a class of very weak H-acids (pKa=33 where pKa-universal index of acidity).

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул нафталина [1], антрацена [1] методом MNDO 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. Представленные модели, очевидно, являются кластерными линейными моделями графена [3]. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [4].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул нафталина, антрацена получено методом MNDO и показано на рис.1,2 и в табл. 1-4.

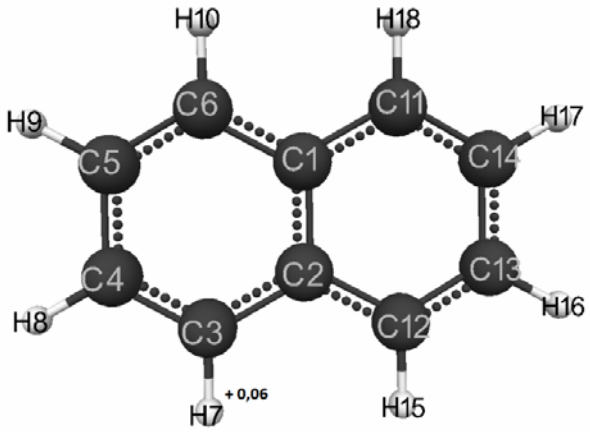

Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы нафталина.
(E_0= -134162 кДж/моль, $E_{эл}$= -653159 кДж/моль)

Применяя известную формулу [5-6] pKa=42.11-147.18q_{max}^{H+} (где q_{max}^{H+} = +0.06 - максимальный заряд на атоме водорода, pKa - универсальный показатель кислотности), с успехом используемую, например в работах [7-16], находим значение кислотной силы этих соединений pKa=33.

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул нафталина, антрацена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединения. Теоретически оценена их кислотная сила pKa=33. Установлено, что молекулы этих пиримидинов обладают одинаковой кислотной силой и относится к классу очень слабых H-кислот (pKa>14).

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

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.43	C(3)-C(2)-C(1)	119	C(1)	-0.04
C(2)-C(3)	1.44	C(14)-C(11)-C(1)	121	C(2)	-0.04
C(3)-C(4)	1.38	C(4)-C(3)-C(2)	121	C(3)	-0.04
C(4)-C(5)	1.43	C(11)-C(1)-C(2)	119	C(4)	-0.06
C(5)-C(6)	1.38	C(5)-C(4)-C(3)	120	C(5)	-0.06
C(6)-C(1)	1.44	C(12)-C(2)-C(3)	122	C(6)	-0.04
H(7)-C(3)	1.09	C(6)-C(5)-C(4)	120	H(7)	**0.06**
H(8)-C(4)	1.09	C(1)-C(6)-C(5)	121	H(8)	0.06
H(9)-C(5)	1.09	C(2)-C(1)-C(6)	119	H(9)	0.06
H(10)-C(6)	1.09	C(11)-C(1)-C(6)	122	H(10)	0.06
C(11)-C(14)	1.38	C(4)-C(3)-H(7)	120	C(11)	-0.04
C(11)-C(1)	1.44	C(5)-C(4)-H(8)	119	C(12)	-0.04
C(12)-C(2)	1.44	C(6)-C(5)-H(9)	121	C(13)	-0.06
C(13)-C(12)	1.38	C(1)-C(6)-H(10)	119	C(14)	-0.06
C(14)-C(13)	1.43	C(13)-C(14)-H(11)	120	H(15)	0.06
H(15)-C(12)	1.09	C(1)-C(2)-H(12)	119	H(16)	0.06
H(16)-C(13)	1.09	C(2)-C(12)-H(13)	121	H(17)	0.06
H(17)-C(14)	1.09	C(12)-C(13)-C(14)	120	H(18)	0.06
H(18)-C(11)	1.09	C(13)-C(12)-H(15)	120		
		C(14)-C(13)-H(16)	119		
		C(11)-C(14)-H(17)	121		
		C(1)-C(11)-H(18)	119		

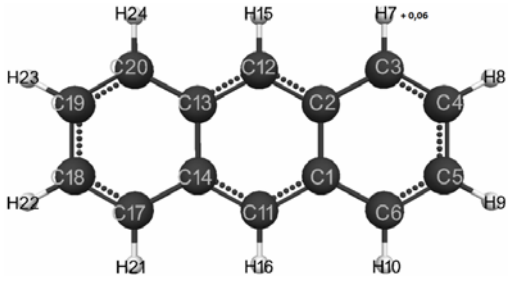

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы антрацена.
(E_0= -186165 кДж/моль, $E_{эл}$= -1057562 кДж/моль)

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах антрацена

Длины связей	R,A	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2)	1.45	C(3)-C(2)-C(1)	118	C(1)	-0.03
C(2)-C(3)	1.45	C(14)-C(11)-C(1)	122	C(2)	-0.03
C(3)-C(4)	1.37	C(4)-C(3)-C(2)	121	C(3)	-0.03
C(4)-C(5)	1.44	C(11)-C(1)-C(2)	119	C(4)	-0.06
C(5)-C(6)	1.37	C(5)-C(4)-C(3)	120	C(5)	-0.06
C(6)-C(1)	1.45	C(12)-C(2)-C(3)	122	C(6)	-0.04
H(7)-C(3)	1.09	C(6)-C(5)-C(4)	120	H(7)	**0.06**
H(8)-C(4)	1.09	C(1)-C(6)-C(5)	121	H(8)	0.06
H(9)-C(5)	1.09	C(2)-C(1)-C(6)	118	H(9)	0.06
H(10)-C(6)	1.09	C(11)-C(1)-C(6)	122	H(10)	0.06
C(11)-C(14)	1.41	C(4)-C(3)-H(7)	120	C(11)	-0.02
C(11)-C(1)	1.41	C(5)-C(4)-H(8)	119	C(12)	-0.02
C(12)-C(2)	1.41	C(6)-C(5)-H(9)	121	C(13)	-0.04
C(13)-C(12)	1.41	C(1)-C(6)-H(10)	119	C(14)	-0.04
C(14)-C(13)	1.45	C(13)-C(14)-C(11)	119	H(15)	0.04
H(15)-C(12)	1.09	C(17)-C(14)-C(11)	122	H(16)	0.04
H(16)-C(11)	1.09	C(1)-C(2)-C(12)	119	C(17)	-0.04
C(17)-C(18)	1.37	C(20)-C(13)-C(12)	122	C(18)	-0.06
C(17)-C(14)	1.45	C(2)-C(12)-C(13)	122	C(19)	-0.06
C(18)-C(19)	1.44	C(17)-C(14)-C(13)	118	C(20)	-0.04
C(19)-C(20)	1.37	C(12)-C(13)-C(14)	119	H(21)	0.06
C(20)-C(13)	1.45	C(18)-C(17)-C(14)	121	H(22)	0.06
H(21)-C(17)	1.09	C(2)-C(12)-H(15)	119	H(23)	0.06
H(22)-C(18)	1.09	C(14)-C(11)-H(16)	119	H(24)	0.06
H(23)-C(19)	1.09	C(19)-C(18)-C(17)	120		
H(24)-C(20)	1.09	C(20)-C(19)-C(18)	120		
		C(13)-C(20)-C(19)	121		
		C(14)-C(13)-C(20)	118		
		C(18)-C(17)-H(21)	120		
		C(19)-C(18)-H(22)	119		
		C(20)-C(19)-H(23)	121		
		C(13)-C(20)-H(24)	119		

Таблица 3 - Общая энергия(E_0), электронная энергия ($E_{эл}$), максимальный заряд на атоме водорода (q_{max}^{H+}), универсальный показатель кислотности (pKa) молекул нафталина, антрацена

№	Молекулы	$-E_0$ кДж/моль	q_{max}^{H+}	pKa
1	диибензол	-134162	+0.06	33
2	антрацен	-186165	+0.06	33

Литература

1. Химическая энциклопедия. –М: Изд-во «Советская энциклопедия», 1988.,т1 и т3.
2. M.W.Shmidt, K.K.Baldrosge, J.A. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Enseh, S.Koseki, N.Matsvnaga., K.A. Nguyen, S. J. SU, and anothers. J. Comput. Chem.14, 1347-1363, (1993).
3. K. S. Novoselov, et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, Science 306, 666 (2004); DOI: 10.1126/science.1102896
4. B.M. Bode and M.S. Gordon J. Mol. Graphics Mod., 16, 1998, 133-138.
5. V.A. Babkin, R.G. Fedunov, K.S. Minsker and anothers. Oxidation communication, 2002, №1, 25, 21-47.
6. V.A. Babkin and others/ Oxidation communication, 21, №4, 1998, pp 454-460.
7. В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации гексен-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 93-95.
8. В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации декен-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 97-99.
9. В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации нонен-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 99-102.
10. В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации октен-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 103-104.
11. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Квантово-химический расчет молекулы изобутилена методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 176-177.
12. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилбутена-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 177-179.
13. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилбутена-2 методом MNDO. сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 179-180.
14. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилпентена-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010 г., с 181-182.
15. В.А. Бабкин, Д.С. Андреев. Квантово-химический расчет молекулы 2-этилбутена-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ, 2010г.,с.183-185.
16. В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации гептен-1 методом MNDO. В сборнике научных статей: Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем. Т.1 –Волгоград: изд-во ВолГУ,2010г., с 95-97.

© **В. А. Бабкин** - д-р хим. наук, проф. нач. научн. отдела Себряковского филиала Волгоградского госуд. архитектурно-строительного ун-та, Babkin_v.a@mail.ru; **В. В. Трифонов** – студ. того же ун-та, dr.t2v@mail.ru; **Н. Г. Лебедев** – проф. каф. теоретической физики и волновых процессов Физ-тех. ВолГУ; **В. Ю. Дмитриев –** асп. ВолгГАСУ; **Д. С. Андреев** – студ. Себряковского филиала Волгоградского госуд. архитектурно-строительного ун-та, power_words@mail.ru, **О. В. Стоянов -** д-р хим. наук, проф., зав. каф. технологии пластических масс КНИТУ; **Г. Е. Заиков** - д-р хим. наук, проф. Института биохимической физики РАН, chembio@sky.chph.ras.ru.