

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина [1] методом АВ 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 аценафтадена и 1,2-дигидронафталина получена методом АВ INITIO в базисе 6-311G\*\* и показаны на рис.1-2 и в табл.1-2. Используя известную формулу  $pK_a = 49,04 - 134,61q_{\max}H^+$  [4] ( $q_{\max}H^+ = +0,10$ - максимальный заряд на атоме водорода,  $pK_a$ - универсальный показатель кислотности), которая с успехом используется, например, в работах [5-9], находим значение кислотной силы равное  $pK_a = 36$ .

рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы аценафтадена. ( $E_0 = -1203410$  кДж/моль,  $E_{эл} = -2815139$  кДж/моль) Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул аценафтадена и 1,2-дигидронафталина методом АВ INITIO в базисе 6-311G\*\*. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила  $pK_a = 36$ . Установлено, что аценафтаден и 1,2-дигидронафталин относятся к классу очень слабых Н-кислот ( $pK_a > 14$ ). Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы аценафтадена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(3)-C(10) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(5)-C(6) C(6)-C(1) C(7)-C(2) C(7)-C(18) C(8)-C(7) C(9)-C(8) C(10)-C(9) C(11)-C(1) H(12)-C(6) H(13)-C(5) H(14)-C(4) H(15)-C(10) H(16)-C(9) H(17)-C(8) C(18)-C(11) H(19)-C(11) H(20)-C(18)	1,41 1,38 1,42 1,42 1,36 1,43 1,36 1,41 1,48 1,36 1,43 1,36 1,48 1,08 1,08 1,08 1,08 1,08 1,08 1,34 1,07 1,07	C(1)-C(2)-C(3) C(9)-C(10)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(3)-C(4)-C(5) C(1)-C(6)-C(5) C(2)-C(1)-C(6) C(1)-C(2)-C(7) C(11)-C(18)-C(7) C(2)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(8)-C(9)-C(10) C(2)-C(1)-C(11) C(1)-C(6)-H(12) C(4)-C(5)-H(13) C(3)-C(4)-H(14) C(9)-C(10)-H(15) C(8)-C(9)-H(16) C(7)-C(8)-H(17) C(1)-C(11)-C(18) C(1)-C(11)-H(19) C(11)-C(18)-H(20)

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,2-дигидронафталина ( $E_0 = -1017124$  кДж/моль,  $E_{эл} = -2470782$  кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,2-дигидронафталина

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(5)-C(6) C(6)-C(1) C(7)-C(2) C(8)-C(7) C(9)-C(8) C(9)-C(10) C(10)-C(3) H(11)-C(2) H(12)-C(3) H(13)-C(4) H(14)-C(4) H(15)-C(5) H(16)-C(5) H(17)-C(6) H(18)-C(6) H(19)-C(1) H(20)-C(1) H(21)-C(7) H(22)-C(8) H(23)-C(9) H(24)-C(9) H(25)-C(10) H(26)-C(10)	1,53 1,54 1,53 1,53 1,53 1,53 1,51 1,32 1,51 1,53 1,53 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,08 1,08 1,09 1,09 1,09 1,09	C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(3)-C(4)-C(5) C(1)-C(6)-C(5) C(2)-C(1)-C(6) C(1)-C(2)-

C(7) C(2)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(3)-C(10)-C(9) C(2)-C(3)-C(10) C(1)-C(2)-H(11) C(2)-  
C(3)-H(12) C(3)-C(4)-H(13) C(3)-C(4)-H(14) C(4)-C(5)-H(15) C(4)-C(5)-H(16) C(1)-C(6)-  
H(17) C(1)-C(6)-H(18) C(2)-C(1)-H(19) C(2)-C(1)-H(20) C(2)-C(7)-H(21) C(7)-C(8)-H(22)  
C(8)-C(9)-H(23) C(8)-C(9)-H(24) C(3)-C(10)-H(25) C(3)-C(10)-H(26) 111 110 111 112  
111 113 124 124 111 110 107 107 109 110 109 110 109 110 110 109 117 119 109  
109 111 109