

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 $pK_a = 49,04 - 134,61 q_{max} H^+$ [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-метоксиаллилбензола

Длины связей R, Å Валентные углы Град

C(2)-C(1)	C(3)-C(2)	C(4)-C(3)	C(5)-C(4)	C(6)-C(5)	C(7)-C(1)	C(8)-C(7)	C(9)-C(8)	N(10)-C(3)	N(11)-C(2)	O(12)-C(4)	N(13)-C(5)	N(14)-C(6)	N(15)-C(7)	N(16)-C(7)	N(17)-C(8)	N(18)-C(9)	N(19)-C(9)	C(20)-O(12)	N(21)-C(20)	N(22)-C(20)	N(23)-C(20)	
1,39	1,39	1,38	1,39	1,38	1,52	1,51	1,32	1,08	1,08	1,36	1,08	1,08	1,09	1,09	1,08	1,08	1,08	1,41	1,09	1,09	1,08	1,08
C(1)-C(2)-C(3)	C(2)-C(3)-C(4)	C(3)-C(4)-C(5)	C(4)-C(5)-C(6)	C(2)-C(1)-C(7)	C(1)-C(7)-C(8)	C(7)-C(8)-C(9)	C(2)-C(3)-N(10)	C(1)-C(2)-N(11)	C(3)-C(4)-O(12)	C(4)-C(5)-N(13)	C(5)-C(6)-N(14)	C(1)-C(7)-N(15)	C(1)-C(7)-N(16)	C(7)-C(8)-N(17)	C(8)-C(9)-N(18)	C(8)-C(9)-N(19)	C(4)-O(12)-C(20)	O(12)-C(20)-N(21)	O(12)-C(20)-N(22)	O(12)-C(20)-N(23)	121	120
120	120	121	113	125	121	120	120	119	119	110	109	116	121	122	116	111	111	107	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)	C(3)-C(2)	C(4)-C(3)	C(5)-C(4)	C(6)-C(5)	C(7)-C(1)	C(8)-C(7)	C(9)-C(8)	N(10)-C(3)	N(11)-C(2)	N(12)-C(4)	N(13)-C(5)	N(14)-C(6)	N(15)-C(7)	C(16)-C(7)	N(17)-C(8)	N(18)-C(9)	N(19)-C(9)	N(20)-C(16)	N(21)-C(16)	N(22)-C(16)
1,39	1,38	1,39	1,38	1,39	1,52	1,51	1,32	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,09	1,54	1,08	1,08	1,08	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(4)-C(5)-C(6)	C(2)-C(1)-C(7)	C(1)-C(7)-C(8)	C(7)-C(8)-C(9)	C(2)-C(3)-N(10)	C(1)-C(2)-N(11)	C(3)-C(4)-N(12)	C(4)-C(5)-N(13)	C(5)-C(6)-N(14)	C(1)-C(7)-N(15)	C(1)-C(7)-N(16)	C(7)-C(8)-N(17)	C(8)-C(9)-N(18)	C(8)-C(9)-N(19)	C(4)-O(12)-C(20)	O(12)-C(20)-N(21)	O(12)-C(20)-N(22)	
121	120	120	121	113	125	121	120	120	119	119	110	109	116	121	122	116	111	111	107	

H(12) C(4)-C(5)-H(13) C(5)-C(6)-H(14) C(1)-C(7)-H(15) C(1)-C(7)-C(16) C(7)-C(8)-H(17)
C(8)-C(9)-H(18) C(8)-C(9)-H(19) C(7)-C(16)-H(20) C(7)-C(16)-H(21) C(7)-C(16)-H(22)
121 120 119 120 122 112 125 120 120 120 120 119 107 112 116 121 122 111 111
110