

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул бициклических олефинов 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиена[1] и 2-изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5 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 молекулы 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиена и 2-изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5 получена методом АВ INITIO в базисе 6-311G\*\* и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу  $pK_a = 49,04 - 134,61 \cdot q$  [4] ( $q = +0,11$ - максимальный заряд на рис.

1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиена. ( $E_0 = -1013961$  кДж/моль,  $E_{эл} = -2486281$  кДж/моль) Таблица

1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиена

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(1) C(4)-C(2) C(4)-C(7) C(5)-C(4) C(5)-C(6) C(6)-C(3) C(6)-C(18) C(7)-C(3) H(8)-C(1) H(9)-C(2) H(10)-C(3) H(11)-C(4) C(12)-C(5) H(13)-C(5) H(14)-C(6) H(15)-C(7) H(16)-C(7) C(17)-C(12) C(18)-C(17) H(19)-C(18) H(20)-C(18) H(21)-C(17) H(22)-C(17) H(23)-C(12) H(24)-C(12)	1,32 1,52 1,52 1,54 1,56 1,56 1,56 1,54 1,54 1,07 1,07 1,08 1,08 1,54 1,09 1,09 1,08 1,09 1,54 1,54 1,09 1,09 1,09 1,08 1,09 1,09 C(2)-C(1)-C(3) C(1)-C(2)-C(4) C(3)-C(7)-C(4) C(2)-C(4)-C(5) C(3)-C(6)-C(5) C(1)-C(3)-C(6) C(17)-C(18)-C(6) C(1)-C(3)-C(7) C(2)-C(1)-H(8) C(1)-C(2)-H(9) C(1)-C(3)-H(10) C(2)-C(4)-H(11) C(4)-C(5)-C(12) C(4)-C(5)-H(13) C(3)-C(6)-H(14) C(3)-C(7)-H(15) C(3)-C(7)-H(16) C(5)-C(12)-C(17) C(12)-C(17)-C(18) C(17)-C(18)-H(19) C(17)-C(18)-H(20) C(12)-C(17)-H(21) C(12)-C(17)-H(22) C(5)-C(12)-H(23) C(5)-C(12)-H(24)	108 108 93 109 103 109 107 100 127 127 116 116 119 108 108 113 113 107 105 109 112 112 110 109 113

атоме водорода,  $pK_a$ - универсальный показатель кислотности см. табл.1-2), которая с успехом используется, например, в работах [5-9], находим значение кислотной силы равное  $pK_a = 34$ .

рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5 ( $E_0 = -1013911$  кДж/моль,  $E_{эл} = -2425388$  кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-

изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(1) C(3)-C(6) C(4)-C(2) C(5)-C(4) C(6)-C(5) C(7)-C(4) C(7)-C(3) H(8)-C(1) H(9)-C(2) H(10)-C(3) H(11)-C(4) H(12)-C(5) H(13)-C(6) H(14)-C(7) H(15)-C(7) H(16)-C(2) C(17)-C(1) C(18)-C(17) H(19)-C(18) H(20)-C(18) C(21)-C(17) H(22)-C(21) H(23)-C(21) H(24)-C(21)	1,56 1,57 1,52 1,56 1,52 1,32 1,54 1,54 1,09 1,08 1,08 1,08 1,07 1,07 1,09 1,08 1,09 1,52 1,32 1,08 1,07 1,51 1,08 1,09 1,09 C(2)-C(1)-C(3) C(5)-C(6)-C(3) C(1)-C(2)-C(4) C(2)-C(4)-C(5) C(4)-C(5)-C(6) C(2)-C(4)-C(7) C(1)-C(3)-C(7) C(2)-C(1)-H(8) C(1)-C(2)-H(9) C(1)-C(3)-H(10) C(2)-C(4)-H(11) C(4)-C(5)-H(12) C(5)-C(6)-H(13)	

C(4)-C(7)-H(14) C(4)-C(7)-H(15) C(1)-C(2)-H(16) C(2)-C(1)-C(17) C(1)-C(17)-C(18)  
C(17)-C(18)-H(19) C(17)-C(18)-H(20) C(1)-C(17)-C(21) C(17)-C(21)-H(22) C(17)-C(21)-  
H(23) C(17)-C(21)-H(24) 102 108 103 106 108 101 100 108 114 114 114 125 127 114  
113 110 119 125 121 123 114 111 111 111 Таблица 3 - Общая энергия (E0 ,  
кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода ( $\delta$ ), универсальный  
показатель кислотности (pKa) мономеров № Мономер -E0 pKa 1 1,2-дигидро-эндо-  
дициклопентадиена 1013961 +0,11 34 2 2-изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5  
1013911 +0,11 34 Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический  
расчет молекулы 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиена и 2-  
изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-5 методом AB INITIO в базисе 6-311G\*\*.  
Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого  
соединения. Теоретически оценена его кислотная сила pKa = 34. Установлено,  
что 1,2-дигидро-эндо-дициклопентадиен и 2-изопропенилбицикло[2,2,1]гептена-  
5 относится к классу очень слабых Н-кислот ( $pK_a > 14$ )