

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] $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{max} H^+$ (где $q_{max} H^+ = +0.06$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности), с успехом используемую, например в работах [7-16], находим значение кислотной силы этих соединений $pK_a = 33$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул нафталина, антрацена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 33$. Установлено, что молекулы этих пиримидинов обладают одинаковой кислотной силой и относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы нафталина

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

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, Å	Валентные углы Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(1)-C(2) C(2)-C(3) C(3)-C(4) C(4)-C(5) C(5)-C(6) C(6)-C(1) N(7)-C(3) N(8)-C(4) N(9)-C(5) N(10)-C(6) C(11)-C(14) C(11)-C(1) C(12)-C(2) C(13)-C(12) C(14)-C(13) N(15)-C(12) N(16)-C(11) C(17)-C(18) C(17)-C(14) C(18)-C(19) C(19)-C(20) C(20)-C(13) N(21)-C(17) N(22)-C(18) N(23)-C(19) N(24)-C(20)	1.45 1.45 1.37		

1.44 1.37 1.45 1.09 1.09 1.09 1.09 1.41 1.41 1.41 1.41 1.45 1.09 1.09 1.37 1.45 1.44
 1.37 1.45 1.09 1.09 1.09 1.09 C(3)-C(2)-C(1) C(14)-C(11)-C(1) C(4)-C(3)-C(2) C(11)-
 C(1)-C(2) C(5)-C(4)-C(3) C(12)-C(2)-C(3) C(6)-C(5)-C(4) C(1)-C(6)-C(5) C(2)-C(1)-C(6)
 C(11)-C(1)-C(6) C(4)-C(3)-H(7) C(5)-C(4)-H(8) C(6)-C(5)-H(9) C(1)-C(6)-H(10) C(13)-
 C(14)-C(11) C(17)-C(14)-C(11) C(1)-C(2)-C(12) C(20)-C(13)-C(12) C(2)-C(12)-C(13)
 C(17)-C(14)-C(13) C(12)-C(13)-C(14) C(18)-C(17)-C(14) C(2)-C(12)-H(15) C(14)-C(11)-
 H(16) C(19)-C(18)-C(17) C(20)-C(19)-C(18) C(13)-C(20)-C(19) C(14)-C(13)-C(20) C(18)-
 C(17)-H(21) C(19)-C(18)-H(22) C(20)-C(19)-H(23) C(13)-C(20)-H(24) 118 122 121 119
 120 122 120 121 118 122 120 119 121 119 119 122 119 122 122 118 119 121 119
 119 120 120 121 118 120 119 121 119 C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6) H(7) H(8) H(9)
 H(10) C(11) C(12) C(13) C(14) H(15) H(16) C(17) C(18) C(19) C(20) H(21) H(22) H(23)
 H(24) -0.03 -0.03 -0.03 -0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04
 0.04 0.04 -0.04 -0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 Таблица 3 - Общая энергия(E_0),
 электронная энергия ($E_{эл}$), максимальный заряд на атоме водорода ($q_{\max H^+}$),
 универсальный показатель кислотности (pK_a) молекул нафталина, антрацена №
 Молекулы - E_0 кДж/моль $q_{\max H^+}$ pK_a 1 дибензол -134162 +0.06 33 2 антрацен -
 186165 +0.06 33