

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул тетрацена и пентацена методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом встроенным в PC GAMESS [1], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка их кислотной силы. Представленные модели, очевидно, являются кластерными линейными моделями графена [2]. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул тетрацена, пентацена получено методом MNDO и показано на рис.1,2 и в табл.1-4. Применяя известную формулу [4-5] $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{\max H^+}$ (где $q_{\max H^+} = +0.06$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности) ,с успехом используемую ,например в работах [6-12] , находим значение кислотной силы этих соединений $pK_a = 33$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул тетрацена, пентацена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединения. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 33$. Установлено, что молекулы этих пиримидинов обладают одинаковой кислотной силой и относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы тетрацена. ($E_0 = -238163$ кДж/моль, $E_{эл} = -1510135$ кДж/моль)

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

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)
	H(7)-C(3)	H(8)-C(4)
	H(9)-C(5)	H(10)-C(6)
	C(11)-C(14)	C(11)-C(1)
	C(12)-C(2)	C(13)-C(12)
	C(14)-C(13)	H(15)-C(12)
	H(16)-C(11)	C(17)-C(18)
	C(17)-C(14)	C(18)-C(19)
	C(19)-C(20)	C(20)-C(13)
	H(21)-C(17)	H(22)-C(20)
	C(23)-C(24)	C(23)-C(18)
	C(24)-C(25)	C(25)-C(26)
	C(26)-C(19)	H(27)-C(26)
	H(28)-C(25)	H(29)-C(24)
	H(30)-C(23)	1.46
	1.46	1.37
	1.45	1.37
	1.46	1.09
	1.09	1.09
	1.09	1.09
	1.09	1.43
	1.40	1.40
	1.40	1.43
	1.44	1.09
	1.09	1.09
	1.40	1.43
	1.46	1.40
	1.43	1.09
	1.09	1.37
	1.46	1.45
	1.37	1.46
	1.09	1.09
	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(23)-C(18)-C(17)
	C(20)-C(19)-C(18)	C(24)-C(23)-C(18)
	C(13)-C(20)-C(19)	C(23)-C(18)-C(19)
	C(14)-C(13)-C(20)	C(26)-C(19)-C(20)
	C(18)-C(17)-H(21)	C(13)-C(20)-H(22)
	C(25)-C(24)-C(23)	C(26)-C(25)-C(24)
	C(19)-C(26)-C(25)	C(18)-C(19)-C(26)
	C(19)-C(26)-H(27)	C(26)-C(25)-H(28)
	C(25)-C(24)-H(29)	C(24)-C(23)-H(30)
	118	122
	121	119
	120	123
	120	121
	118	123
	120	118
	121	118
	123	119
	121	122
	118	119
	123	120
	118	120
	121	118
	118	121
	120	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)	C(23)
	C(24)	

C(25) C(26) H(27) H(28) H(29) H(30) -0.04 -0.04 -0.04 -0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06
 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02 0.06 0.06 -0.04 -0.06 -
 0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение
 молекулы пентацена. (E0= -290156 кДж/моль, Eэл= -2000892 кДж/моль) Таблица
 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах
 пентацена 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) H(7)-C(3) H(8)-
 C(4) H(9)-C(5) H(10)-C(6) C(11)-C(14) C(11)-C(1) C(12)-C(2) C(13)-C(12) C(14)-C(13)
 H(15)-C(12) H(16)-C(11) C(17)-C(18) C(17)-C(14) C(18)-C(19) C(19)-C(20) C(20)-C(13)
 H(21)-C(17) H(22)-C(20) C(23)-C(24) C(23)-C(18) C(24)-C(25) C(25)-C(26) C(26)-C(19)
 H(27)-C(26) H(28)-C(23) C(29)-C(32) C(29)-C(24) C(30)-C(25) C(31)-C(30) C(32)-C(31)
 H(33)-C(29) H(34)-C(30) H(35)-C(31) H(36)-C(32) 1.46 1.46 1.37 1.45 1.37 1.46 1.09
 1.09 1.09 1.09 1.44 1.39 1.39 1.44 1.45 1.09 1.09 1.41 1.41 1.45 1.41 1.41 1.09 1.09
 1.39 1.44 1.46 1.39 1.44 1.09 1.09 1.37 1.46 1.46 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(23)-C(18)-
 C(17) C(20)-C(19)-C(18) C(24)-C(23)-C(18) C(13)-C(20)-C(19) C(23)-C(18)-C(19) C(14)-
 C(13)-C(20) C(26)-C(19)-C(20) C(18)-C(17)-H(21) C(13)-C(20)-H(22) C(25)-C(24)-C(23)
 C(29)-C(24)-C(23) C(26)-C(25)-C(24) C(32)-C(29)-C(24) C(19)-C(26)-C(25) C(29)-C(24)-
 C(25) C(18)-C(19)-C(26) C(30)-C(25)-C(26) C(19)-C(26)-H(27) C(24)-C(23)-H(28) C(31)-
 C(32)-C(29) C(24)-C(25)-C(30) C(25)-C(30)-C(31) C(30)-C(31)-C(32) C(32)-C(29)-H(33)
 C(25)-C(30)-H(34) C(30)-C(31)-H(35) C(31)-C(32)-H(36) 118 122 121 119 120 123 120
 121 118 123 120 118 121 118 118 122 119 122 122 119 118 122 120 118 119 122
 119 122 122 118 119 122 119 119 119 123 119 121 122 118 118 123 118 120 120
 118 121 120 120 118 121 118 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) C(23) C(24) C(25)
 C(26) H(27) H(28) C(29) C(30) C(31) C(32) H(33) H(34) H(35) H(36) -0.04 -0.04 -0.04 -
 0.06 -0.06 -0.04 0.06 0.06 0.06 0.06 -0.02 -0.02 -0.04 -0.04 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04
 -0.02 0.06 0.06 -0.02 -0.04 -0.04 -0.02 0.06 0.06 -0.04 -0.04 -0.06 -0.06 0.06 0.06 0.06
 0.06 Таблица 3 - Общая энергия(E0), электронная энергия (Eэл), максимальный
 заряд на атоме водорода (qmaxH+), универсальный показатель кислотности
 (pKa) молекул тетрацена, пентацена № Молекулы -E0 кДж/моль qmaxH+ pKa 1
 тетрацена, -238163 +0.06 33 2 пентацена -290156 +0.06 33