

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы цис,транс-гексадиена-2,4 и цис,цис-гексадиена-2,4 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 его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt[2]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы цис,транс-гексадиена-2,4 и цис,цис-гексадиена-2,4 получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3. Используя известную формулу[3] $pK_a = 42,11 - 147,18 (= +0,05 - \text{максимальный заряд на атоме водорода, } pK_a - \text{универсальный показатель кислотности см. табл.1-3})$, которая с успехом используется, например, в работах [4-13], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 35$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы цис,транс-гексадиена-2,4 и цис,цис-гексадиена-2,4 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 35$. Установлено, что цис,транс-гексадиен-2,4 и цис,цис-гексадиена-2,4 относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы цис,транс-гексадиена-2,4 ($E_0 = -87521$ кДж/моль, $E_{эл} = -350320$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы цис,транс-гексадиена-2,4

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(6)-C(5) H(7)-C(1) H(8)-C(1) H(9)-C(1) H(10)-C(2) H(11)-C(3) H(12)-C(4) H(13)-C(5) H(14)-C(6) H(15)-C(6) H(16)-C(6)	1,50 1,35 1,47 1,35 1,50 1,11 1,11 1,11 1,10 1,10 1,10 1,10 1,11 1,11 1,11 1,11	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)-H(7) C(2)-C(1)-H(8) C(2)-C(1)-H(9) C(1)-C(2)-H(10) C(2)-C(3)-H(11) C(3)-C(4)-H(12) C(4)-C(5)-H(13) C(5)-C(6)-H(14) C(5)-C(6)-H(15) C(5)-C(6)-H(16)
128 127 125 126 111 111 112 114 118 115 120 110 113 110		

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы цис,цис-гексадиена-2,4 ($E_0 = -87518$ кДж/моль, $E_{эл} = -355061$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы цис,цис-гексадиена-2,4

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(6)-C(5) H(7)-C(1) H(8)-C(1) H(9)-C(1) H(10)-C(2) H(11)-C(3) H(12)-C(4) H(13)-C(5) H(14)-C(6) H(15)-C(6) H(16)-C(6)	1,50 1,35 1,47 1,35 1,50 1,11 1,11 1,11 1,10 1,10 1,10 1,10 1,11 1,11 1,11 1,11	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)-H(7) C(2)-C(1)-H(8) C(2)-C(1)-H(9) C(1)-C(2)-H(10) C(2)-C(3)-H(11) C(3)-C(4)-H(12) C(4)-C(5)-H(13) C(5)-C(6)-H(14) C(5)-C(6)-H(15) C(5)-C(6)-H(16)
128 128 128 128 111 111 112 114 119 114 118 113 111 111		

Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (σ), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров № Мономер - E_0 pK_a 1 цис,транс-гексадиена-2,4 87521 +0,05 35 2 цис,цис-гексадиена-2,4 87518 +0,05

