

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы бромпропилиндена и броминдена [1] методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PCGAMESS [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 бромпропилиндена и броминдена получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3.

Используя известную формулу $pK_a = 42,11 - 147,18 \cdot q$ [4] ($q = +0,08$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1-3), которая с успехом используется, например, в работах [5-14], находим значение кислотной силы равное $pK_a = 30$. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы бромпропилиндена ($E_0 = -198947$ кДж/моль, $E_{эл} = -1072749$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бромпропилиндена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(1) C(4)-C(3) C(4)-C(6) C(5)-C(2) C(6)-C(5) C(7)-C(2) C(8)-C(5) C(8)-C(9) C(9)-C(7) H(10)-C(3) H(11)-C(1) H(12)-C(7) H(13)-C(9) H(14)-C(6) H(15)-C(4) C(16)-C(8) C(17)-C(16) C(18)-C(17) Br(19)-C(18) H(20)-C(16) H(21)-C(8) H(22)-C(16) H(23)-C(17) H(24)-C(17) H(25)-C(18) H(26)-C(18)	1,40 1,41 1,40 1,41 1,44 1,40 1,47 1,53 1,53 1,36 1,09 1,09 1,08 1,08 1,09 1,09 1,55 1,54 1,53 1,89 1,11 1,12 1,11 1,11 1,12 1,11 1,11	C(2)-C(1)-C(3) C(1)-C(3)-C(4) C(5)-C(6)-C(4) C(1)-C(2)-C(5) C(2)-C(5)-C(6) C(1)-C(2)-C(7) C(2)-C(5)-C(8) C(7)-C(9)-C(8) C(2)-C(7)-C(9) C(1)-C(3)-H(10) C(2)-C(1)-H(11) C(2)-C(7)-H(12) C(7)-C(9)-H(13) C(5)-C(6)-H(14) C(3)-C(4)-H(15) C(5)-C(8)-C(16) C(8)-C(16)-C(17) C(16)-C(17)-C(18) C(17)-C(18)-Br(19) C(8)-C(16)-H(20) C(5)-C(8)-H(21) C(8)-C(16)-H(22) C(16)-C(17)-H(23) C(16)-C(17)-H(24) C(17)-C(18)-H(25) C(17)-C(18)-H(26)

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы броминдена ($E_0 = -153758$ кДж/моль, $E_{эл} = -689425$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы броминдена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(1) C(4)-C(3) C(4)-C(6) C(5)-C(2) C(6)-C(5) C(7)-C(2) C(8)-C(5) C(8)-C(9) C(9)-C(7) Br(10)-C(4) H(11)-C(3) H(12)-C(1) H(13)-C(7) H(14)-C(9) H(15)-C(8) H(16)-C(8) H(17)-C(6)	1,40 1,41 1,40 1,42 1,44 1,39 1,48 1,52 1,52 1,36 1,84 1,09 1,09 1,08 1,08 1,11 1,11 1,09	C(2)-C(1)-C(3) C(1)-C(3)-C(4) C(5)-C(6)-C(4) C(1)-C(2)-C(5) C(2)-C(5)-C(6) C(1)-C(2)-C(7) C(2)-C(5)-C(8) C(7)-C(9)-C(8) C(2)-C(7)-C(9) C(3)-C(4)-Br(10) C(1)-C(3)-H(11) C(2)-C(1)-H(12) C(2)-C(7)-H(13) C(7)-C(9)-H(14) C(5)-C(8)-H(15) C(5)-C(8)-H(16) C(5)-C(6)-H(17)

Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (q), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров Мономер - E_0 pK_a бромпропилиндена

198947 +0,08 30 броминдена 153758 +0,08 30 Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы бромпропилиндена и броминдена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 30$. Установлено, что бромпропилиндена и броминдена относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$).