

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2 и 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана [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 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 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2 и 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана 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] ($q = +0,07$ - 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 $pK_a = 32$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2 и 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 32$. Установлено, что 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутен-2 и 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2 ($E_0 = -297916$ кДж/моль, $E_{эл} = -2085995$ кДж/моль) Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана ($E_0 = -300793$ кДж/моль, $E_{эл} = -2171123$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды на атомах
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) H(17)-C(16) H(18)-C(8) H(19)-C(16) C(20)-C(16) C(21)-C(20) C(22)-C(21) C(23)-C(22) C(24)-C(23) C(25)-C(23) C(26)-C(25) C(26)-C(27) C(27)-C(24) C(28)-C(26) C(29)-C(28) C(30)-C(29) C(30)-C(31) C(31)-C(25) H(32)-C(28) H(33)-C(29) H(34)-C(30) H(35)-C(31) H(36)-C(21) H(37)-C(20) H(38)-C(22) H(39)-C(22) H(40)-C(23) H(41)-C(27) H(42)-C(24)	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 1,12 1,12 1,11 1,51 1,35 1,51 1,55 1,53 1,53 1,44 1,47 1,36 1,40 1,41 1,40 1,41 1,40 1,09 1,09 1,09 1,09 1,10 1,10 1,12 1,11 1,12 1,08 1,08	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)-H(17) C(5)-C(8)-H(18) C(8)-C(16)-H(19) C(8)-C(16)-C(20) C(16)-C(20)-C(21) C(20)-C(21)-C(22) C(21)-C(22)-C(23) C(22)-C(23)-C(24) C(22)-C(23)-C(25) C(23)-C(25)-C(26) C(24)-C(27)-C(26) C(23)-C(24)-C(27) C(25)-C(26)-C(28) C(26)-C(28)-C(29) C(28)-C(29)-C(30) C(25)-C(31)-C(30) C(23)-C(25)-C(31) C(26)-C(28)-H(32) C(28)-C(29)-H(33)

C(29)-C(30)-H(34) C(25)-C(31)-H(35) C(20)-C(21)-H(36) C(16)-C(20)-H(37) C(21)-C(22)-
 H(38) C(21)-C(22)-H(39) C(22)-C(23)-H(40) C(24)-C(27)-H(41) C(23)-C(24)-H(42) 119
 121 119 121 120 131 109 112 110 119 121 123 127 122 120 114 109 108 109 115
 125 125 115 115 115 109 110 112 121 119 121 119 131 121 119 120 122 120 114
 107 111 109 127 122 Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные
 углы и заряды на атомах молекулы 1,2 -(3,3'-диинденил)бутана Длины связей
 R,Å Валентные углы Град C(2)-C(1) C(3)-C(1) C(4)-C(2) C(4)-C(6) C(5)-C(3) C(6)-C(5)
 C(7)-C(3) C(8)-C(5) C(8)-C(9) C(9)-C(7) C(10)-C(40) C(11)-C(10) C(12)-C(11) C(13)-
 C(12) C(13)-C(14) C(14)-C(10) C(15)-C(14) C(16)-C(13) C(17)-C(15) C(17)-C(18) C(18)-
 C(16) H(19)-C(2) H(20)-C(1) H(21)-C(4) H(22)-C(6) H(23)-C(8) H(24)-C(8) H(25)-C(12)
 H(26)-C(12) H(27)-C(9) H(28)-C(11) H(29)-C(16) H(30)-C(18) H(31)-C(17) H(32)-C(15)
 C(33)-C(7) C(34)-C(33) H(35)-C(33) H(36)-C(33) H(37)-C(34) H(38)-C(34) C(39)-C(34)
 C(40)-C(39) H(41)-C(39) H(42)-C(39) H(43)-C(40) H(44)-C(40) 1,41 1,40 1,40 1,41 1,44
 1,40 1,49 1,52 1,52 1,37 1,50 1,37 1,52 1,52 1,44 1,49 1,40 1,40 1,41 1,40 1,41 1,09
 1,09 1,09 1,09 1,11 1,11 1,11 1,11 1,08 1,08 1,09 1,09 1,09 1,09 1,50 1,54 1,11 1,12
 1,11 1,11 1,54 1,55 1,12 1,11 1,12 1,12 C(2)-C(1)-C(3) C(1)-C(2)-C(4) C(5)-C(6)-C(4)
 C(1)-C(3)-C(5) C(3)-C(5)-C(6) C(1)-C(3)-C(7) C(3)-C(5)-C(8) C(7)-C(9)-C(8) C(3)-C(7)-
 C(9) C(39)-C(40)-C(10) C(40)-C(10)-C(11) C(10)-C(11)-C(12) C(11)-C(12)-C(13) C(10)-
 C(14)-C(13) C(40)-C(10)-C(14) C(10)-C(14)-C(15) C(12)-C(13)-C(16) C(14)-C(15)-C(17)
 C(16)-C(18)-C(17) C(13)-C(16)-C(18) C(1)-C(2)-H(19) C(2)-C(1)-H(20) C(2)-C(4)-H(21)
 C(5)-C(6)-H(22) C(5)-C(8)-H(23) C(5)-C(8)-H(24) C(11)-C(12)-H(25) C(11)-C(12)-H(26)
 C(7)-C(9)-H(27) C(10)-C(11)-H(28) C(13)-C(16)-H(29) C(16)-C(18)-H(30) C(15)-C(17)-
 H(31) C(14)-C(15)-H(32) C(3)-C(7)-C(33) C(7)-C(33)-C(34) C(7)-C(33)-H(35) C(7)-C(33)-
 H(36) C(33)-C(34)-H(37) C(33)-C(34)-H(38) C(33)-C(34)-C(39) C(34)-C(39)-C(40) C(34)-
 C(39)-H(41) C(34)-C(39)-H(42) C(39)-C(40)-H(43) C(39)-C(40)-H(44) 119 121 119 120
 121 132 109 112 108 116 127 112 102 108 125 132 130 119 121 119 119 119 120
 121 112 112 112 112 127 127 121 120 119 122 125 114 109 109 109 109 114 116
 109 109 108 109 Таблица 3 - Общая энергия (E0 , кДж/моль), максимальный заряд
 на атоме водорода (), универсальный показатель кислотности (pKa) мономеров
 Мономер -E0 pKa 1,4 -(1,1'-диинденил)транс-бутена-2 297916 +0,07 32 1,2 -(3,3'-
 диинденил)бутана 300793 +0,07 32