

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы бутадиена-1,3 и 2-метилбутадиена-1,3 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 бутадиена-1,3 и 2-метилбутадиена-1,3 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 $pK_a = 35$. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы бутадиена-1,3 ($E_0 = -57342$ кДж/моль, $E_{эл} = -181636$ кДж/моль) Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы бутадиена-1,3 и 2-метилбутадиена-1,3 методом MNDO.

Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 35$. Установлено, что бутадиен-1,3 и 2-метилбутадиена-1,3 относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бутадиена-1,3

Длины связей R, А	Валентные углы Град
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) H(5)-C(1) H(6)-C(1) H(7)-C(2) H(8)-C(3) H(9)-C(4) H(10)-C(4)	1,34 1,47 1,34 1,09 1,09 1,10 1,10 1,09 1,09
C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(2)-C(1)-H(5) C(2)-C(1)-H(6) C(1)-C(2)-H(7) C(2)-C(3)-H(8) C(3)-C(4)-H(9) C(3)-C(4)-H(10)	126 126 122 124 119 116 124 122

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-метилбутадиена-1,3 ($E_0 = -72420$ кДж/моль, $E_{эл} = -267286$ кДж/моль)

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-метилбутадиена-1,3

Длины связей R, А	Валентные углы Град
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) H(5)-C(1) H(6)-C(1) H(7)-C(3) H(8)-C(4) H(9)-C(4) C(10)-C(2) H(11)-C(10) H(12)-C(10) H(13)-C(10)	1,35 1,48 1,34 1,09 1,09 1,10 1,09 1,09 1,51 1,11 1,11 1,11
C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(2)-C(1)-H(5) C(2)-C(1)-H(6) C(2)-C(3)-H(7) C(3)-C(4)-H(8) C(3)-C(4)-H(9) C(1)-C(2)-C(10) C(2)-C(10)-H(11) C(2)-C(10)-H(12) C(2)-C(10)-H(13)	121 126 124 123 114 124 122 123 111 111 112

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 бутадиена-1,3	-57342	+0,05 35
2 2-метилбутадиена-1,3	-72420	+0,05 35