

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 2-фенилбутадиена-1,3 и 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3 [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 MacMolPl t[3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы 2-фенилбутадиена-1,3 и 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3 получена методом MNDO и показаны на рис.1-2 и в табл.1-2. Используя известную формулу [4] $pK_a = 42,11 - 147,18 (E_0 + 0,06 - E_{эл})$ Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2-фенилбутадиена-1,3 ($E_0 = -136610$ кДж/моль, $E_{эл} = -671042$ кДж/моль) 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 $pK_a = 33$. Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-фенилбутадиена-1,3

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(2) C(5)-C(10) C(6)-C(5) C(7)-C(6) C(8)-C(7) C(9)-C(8) C(10)-C(9) H(11)-C(1) H(12)-C(3) H(13)-C(4) H(14)-C(4) H(15)-C(1) H(16)-C(10) H(17)-C(9) H(18)-C(8) H(19)-C(7) H(20)-C(6)	1,35 1,48 1,34 1,49 1,41 1,41 1,41 1,41 1,41 1,41 1,09 1,10 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09	C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(1)-C(2)-C(5) C(9)-C(10)-C(5) C(2)-C(5)-C(6) C(5)-C(6)-C(7) C(6)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(8)-C(9)-C(10) C(2)-C(5)-C(10) C(2)-C(1)-H(11) C(2)-C(3)-H(12) C(3)-C(4)-H(13) C(3)-C(4)-H(14) C(2)-C(1)-H(15) C(9)-C(10)-H(16) C(8)-C(9)-H(17) C(7)-C(8)-H(18) C(6)-C(7)-H(19) C(5)-C(6)-H(20)
123 126 122 121 121 121 120 120 120 121 123 114 124 122 123 119 120 120 120 120		

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3 ($E_0 = -151708$ кДж/моль, $E_{эл} = -780374$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(1) C(5)-C(10) C(6)-C(5) C(7)-C(6) C(8)-C(7) C(9)-C(8) C(10)-C(9) H(11)-C(2) H(12)-C(3) H(13)-C(4) H(14)-C(1) H(15)-C(10) H(16)-C(9) H(17)-C(8) H(18)-C(7) H(19)-C(6) C(20)-C(4) H(21)-C(20) H(22)-C(20) H(23)-C(20)	1,35 1,47 1,35 1,48 1,41 1,42 1,41 1,41 1,41 1,41 1,10 1,10 1,10 1,10 1,09 1,09 1,09 1,09 1,09 1,50 1,11 1,11 1,11	C(1)-C(2)-C(3) C(2)-C(3)-C(4) C(2)-C(1)-C(5) C(9)-C(10)-C(5) C(1)-C(5)-C(6) C(5)-C(6)-C(7) C(6)-C(7)-C(8) C(7)-C(8)-C(9) C(8)-C(9)-C(10) C(1)-C(5)-C(10) C(1)-C(2)-H(11) C(2)-C(3)-H(12) C(3)-C(4)-H(13) C(2)-C(1)-H(14) C(9)-C(10)-H(15) C(8)-C(9)-H(16) C(7)-C(8)-H(17) C(6)-C(7)-H(18) C(5)-C(6)-H(19) C(3)-C(4)-C(20) C(4)-C(20)-H(21) C(4)-C(20)-H(22) C(4)-C(20)-H(23)
127 127 128 121 121 121 120 120 120 121 118 114 118 119 119 120 120 120 120 128 111 112 111		

Таблица 3 - Общая энергия (E_0 , кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (ρ), универсальный показатель кислотности (pK_a) мономеров №

Мономер -Е0 рКа 1 2-фенилбутадиен-1,3 136610 +0,06 33 2 1-фенил-4-метилбутадиен-1,3 151708 +0,06 33 Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы 2-фенилбутадиена-1,3 и 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3 методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила рКа = 33. Установлено, что 2-фенилбутадиен-1,3 и 1-фенил-4-метилбутадиена-1,3 относится к классу очень слабых Н-кислот (рКа>14)