

Введение Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 2,3-диметилбутадиена-1,3, аллоцимена и хлоропрена [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 2,3-диметилбутадиена-1,3, аллоцимена и хлоропрена получена методом MNDO и показаны на рис. 1-3 и в табл. 1-4. Используя известную формулу [4] $pK_a = 42,11 - 147,18 (+0,04 \leq q_{\max H^+} \leq +0,07)$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1-4), которая с успехом используется, например, в работах [5-14], находим значение кислотной силы равное $32 \leq pK_a \leq 36$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы 2,3-диметилбутадиена-1,3, аллоцимена и хлоропрена методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила $pK_a = 36$. Установлено, что 2,3-диметилбутадиен-1,3, аллоцимена и хлоропрена относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 2,3-диметилбутадиена-1,3 ($E_0 = -87497$ кДж/моль, $E_{эл} = -364900$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2,3-диметилбутадиена-1,3

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) H(5)-C(1) H(6)-C(1) H(7)-C(4) H(8)-C(4) C(9)-C(2) H(10)-C(9) H(11)-C(9) H(12)-C(9) C(13)-C(3) H(14)-C(13) H(15)-C(13) H(16)-C(13)	1,35 1,49 1,35 1,09 1,09 1,09 1,09 1,51 1,11 1,11 1,11 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(3)-C(4)-H(7) C(3)-C(4)-H(8) C(1)-C(2)-C(9) C(2)-C(9)-H(10) C(2)-C(9)-H(11) C(2)-C(9)-H(12) C(2)-C(3)-C(13) C(3)-C(13)-H(14) C(3)-C(13)-H(15) C(3)-C(13)-H(16)
121 121 124 123 124 123 123 111 111 112 117 112 110 112		

Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы аллоцимена ($E_0 = -144975$ кДж/моль, $E_{эл} = -750800$ кДж/моль) Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы аллоцимена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1) C(3)-C(2) C(4)-C(3) C(5)-C(4) C(6)-C(5) C(7)-C(6) C(8)-C(5) C(9)-C(1) C(10)-C(1) H(11)-C(9) H(12)-C(9) H(13)-C(9) H(14)-C(10) H(15)-C(10) H(16)-C(10) H(17)-C(2) H(18)-C(3) H(19)-C(4) H(20)-C(6) H(21)-C(7) H(22)-C(7) H(23)-C(7) H(24)-C(8) H(25)-C(8) H(26)-C(8)	1,36 1,47 1,35 1,48 1,36 1,50 1,51 1,51 1,51 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 1,11 1,10 1,10 1,10 1,10 1,11 1,11 1,11 1,11 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(5)-C(6)-C(7) C(4)-C(5)-C(8) C(2)-C(1)-C(9) C(2)-C(1)-C(10) C(1)-C(9)-H(11) C(1)-C(9)-H(12) C(1)-C(9)-H(13) C(1)-C(10)-H(14) C(1)-C(10)-H(15) C(1)-C(10)-H(16) C(1)-C(2)-H(17) C(2)-C(3)-H(18) C(3)-C(4)-H(19) C(5)-C(6)-H(20) C(6)-C(7)-H(21) C(6)-C(7)-H(22) C(6)-C(7)-H(23) C(5)-

C(8)-H(24) C(5)-C(8)-H(25) C(5)-C(8)-H(26) 127 125 126 120 128 116 123 121 112 111
 111 111 113 111 120 114 121 119 111 112 111 111 112 111 Рис. 3 - Геометрическое
 и электронное строение молекулы хлоропрена ($E_0 = -90144$ кДж/моль, $E_{эл} = -$
 272226 кДж/моль) Таблица 3 - Оптимизированные длины связей, валентные углы
 и заряды на атомах молекулы хлоропрена Длины связей R, Å 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)
 Cl(10)-C(2) 1,34 1,47 1,34 1,09 1,09 1,10 1,09 1,09 1,77 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)-
 Cl(10) 128 126 122 124 114 122 124 119 Таблица 4 - Общая энергия (E_0 ,
 кДж/моль), максимальный заряд на атоме водорода (ρ), универсальный
 показатель кислотности (pK_a) мономеров № Мономер $-E_0$ pK_a 1 2,3-
 диметилбутадиен-1,3 87497 +0,04 36 2 аллоцимен 144975 +0,06 33 3 хлоропрен
 90144 +0,07 32