

Введение В 1970 г. Ческа и сотрудники синтезировали мономер 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроинден и исследовали его полимеризацию [1-3]. А бензилинден полимеризовали ещё раньше в 1928 году, в присутствии $SbCl_5$ в хлороформе при комнатной температуре [2-3]. Несмотря на это, механизмы элементарных актов полимеризации этих мономеров на электронном уровне не изучены. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроиндена и бензилиндена методом AM1 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS[4], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы как первого шага в изучении механизма полимеризации на электронном уровне. Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [5]. Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроиндена и бензилиндена получены методом AM1 и показаны на рис.1-2 и в табл.1-3.

Применяя формулу $pK_a = 47.74 - 154.949 \cdot \rho$ [6] ($\rho = +0.14$ и $+0.06$ максимальные заряды на атомах водорода, pK_a универсальный показатель кислотности см. табл.1-2), находим значения кислотной силы равные $pK_a = 26$ и 33. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроиндена и бензилиндена методом AM1. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценены их кислотные силы $pK_a = 26$ (это совпадает с известными данными [7]) и 33, соответственно для изучаемых мономеров. Установлено, что 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроинден и бензилинден относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Таблица 1

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроиндена

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	Заряды
C(2)-C(1)	C(3)-C(2)	
C(4)-C(3)	C(5)-C(1)	
C(6)-C(4)	C(7)-C(5)	
C(8)-C(6)	C(9)-C(7)	
C(10)-C(8)	C(11)-C(10)	
C(12)-C(10)	H(13)-C(2)	
H(14)-C(1)	H(15)-C(1)	
H(16)-C(3)	H(17)-C(4)	
H(18)-C(4)	H(19)-C(5)	
H(20)-C(6)	H(21)-C(7)	
H(22)-C(9)	H(23)-C(11)	
H(24)-C(11)	H(25)-C(11)	
H(26)-C(12)	H(27)-C(12)	
H(28)-C(12)		
1.49	1.34	1.49
1.51	1.51	1.50
1.51	1.35	1.34
1.48	1.48	1.10
1.12	1.12	1.10
1.12	1.12	1.13
1.13	1.09	1.09
1.12	1.12	1.12
1.12	1.12	1.12
1.12	1.12	1.12
C(3)-C(2)-C(1)	C(4)-C(3)-C(2)	C(5)-C(1)-C(2)
C(6)-C(4)-C(3)	C(7)-C(5)-C(1)	C(8)-C(6)-C(4)
C(9)-C(7)-C(5)	C(10)-C(8)-C(6)	C(11)-C(10)-C(8)
C(12)-C(10)-C(8)	C(1)-C(2)-H(13)	C(2)-C(1)-H(14)
C(2)-C(1)-H(15)	C(2)-C(3)-H(16)	C(3)-C(4)-H(17)
C(3)-C(4)-H(18)	C(1)-C(5)-H(19)	C(4)-C(6)-H(20)
C(5)-C(7)-H(21)	C(7)-C(9)-H(22)	C(10)-C(11)-H(23)
C(10)-C(11)-H(24)	C(10)-C(11)-H(25)	C(10)-C(12)-H(26)
C(10)-C(12)-H(27)	C(10)-C(12)-H(28)	
124	124	108
109	122	123
110	128	122
123	115	110
110	110	121
110	109	108
107	122	127
111	111	
110	112	110
110		

Рис. 1 Геометрическое и электронное строение молекулы 1-изопропилинден-3а,4,7,7а-тетрагидроиндена ($E_0 = -169387$ кДж/моль, $E_{эл} = -$

1022416 кДж/моль) Таблица 2 Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы бензилиндена

Длины связей R, Å		Валентные углы Град	
C(2)-C(1)	C(3)-C(2)	C(3)-C(6)	C(4)-C(1)
C(5)-C(4)	C(6)-C(5)	C(8)-C(6)	C(6)-C(3)
C(11)-C(10)	C(12)-C(10)	C(13)-C(11)	C(14)-C(12)
C(15)-C(14)	C(15)-C(13)	C(10)-C(30)	H(16)-C(1)
H(17)-C(2)	H(18)-C(3)	H(19)-C(4)	H(20)-C(7)
H(21)-C(9)	H(22)-C(12)	H(23)-C(11)	H(24)-C(13)
H(25)-C(14)	H(26)-C(15)	H(28)-C(27)	1.39
1.39	1.39	1.40	1.38
1.46	1.44	1.39	1.52
1.52	1.47	1.45	1.39
1.37	1.53	1.09	1.09
1.09	1.09	1.09	1.09
1.08	1.08	1.10	1.12
1.09	1.10	1.09	1.06
C(3)-C(2)-C(1)	C(4)-C(1)-C(2)	C(6)-C(3)-C(2)	C(6)-C(5)-C(7)
C(7)-C(9)-C(8)	C(8)-C(27)-C(10)	C(13)-C(11)-C(10)	C(14)-C(12)-C(10)
C(15)-C(13)-C(11)	H(18)-C(3)-C(2)	H(17)-C(2)-C(1)	H(19)-C(4)-C(1)
H(20)-C(7)-C(5)	H(21)-C(9)-C(7)	H(22)-C(11)-C(10)	H(23)-C(12)-C(10)
H(24)-C(13)-C(10)	H(25)-C(14)-C(12)	H(26)-C(15)-C(14)	H(28)-C(27)-C(10)
H(28)-C(27)-C(8)	121	121	118
107	109	108	109
113	120	120	119
120	123	127	119
119	119	119	119
120	114	119	

Таблица 3 Общая энергия (E0), электронная энергия (Еэл), максимальный заряд на атоме водорода (qmaxH+) и универсальный показатель кислотности (pKa) молекул Мономер -E0 (кДж/ моль) - Еэл (кДж/ моль) qmaxH+ pKa

Мономер	-E0 (кДж/ моль)	Еэл (кДж/ моль)	qmaxH+	pKa
1-изопропил инден	3а,4,7,7а-тетрагидро инден - 169387	-1022416	+0,14	26
бензилинден	-139474	-709881	+0,06	33

Рис. 2 Геометрическое и электронное строение молекулы бензилинден (E0= -139474 кДж/моль, Еэл= -709881 кДж/моль)