

Введение Оксидные оптические стёкла типа «лёгкий крон», «тяжёлый флинт», линзы Френеля и др. представляют химические соединения весьма сложного стехиометрического состава [1]. В связи с этим, знание даже фрагментов строения этих соединений представляет несомненный интерес. Такими фрагментами, входящими в состав, например, «лёгкого крона», могут быть молекулы 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол) тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 и 1,7-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксан-тетраол-1,3,5,7. До настоящего времени квантово-химические расчёты этих молекул не проводились. Наибольший интерес представляет расчёт этих молекул методом AM1, в связи с тем, что в состав оптического стекла типа ЛК-1 («лёгкий крон», «тяжелый флинт» и др.) входит калий, который параметризован в пакете программ GAMESS только в этом методе [2]. В связи с этим, целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол) тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 и 1,7-ди(циклотриалюмоксандиол)-тетраалюмоксантетраол-1,3,5,7 методом AM1 с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе в рамках молекулярной модели и теоретическая оценка их кислотной силы. Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол) тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 и 1,7-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксантетраол-1,3,5,7 получены методом AM1 и показаны на рис.1-2 и в табл.1. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол) тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 ($E_0 = -648590$ кДж/моль, $E_{эл} = -3361638$ кДж/моль) Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1,7-ди(циклотриалюмо-ксанди-ол)тетра-алюмоксантетраол-1,3,5,7 ($E_0 = -648598$ кДж/моль, $E_{эл} = -3486459$ кДж/моль)

Таблица 1 - Общая энергия (E_0), электронная энергия ($E_{эл}$), максимальный заряд на атоме водорода (q_{maxH^+}) и универсальный показатель кислотности (pK_a) молекул Мономер - E_0 (кДж/моль) - $E_{эл}$ (кДж/моль) q_{maxH^+} pK_a 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол) тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 -648590 -3361638 +0,24 10.6 1,7-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксантетраол-1,3,5,7 -648598 -3486459 +0,22 13.6

Длины связей Al-O в обеих моделях находятся в диапазоне 1,69Å-1,72Å. Длины связей O-H равны 0,95Å -0,96Å. Другие связи в настоящих моделях отсутствуют. Валентные углы Al-O-Al в модели 3,5-ди(циклотриалюмоксандиол)тетра-алюмоксантетраол-1,1,7,7 находятся в диапазоне 123° -141°, O-Al-O находятся в интервале 117°-124°, а Al-O-H - в 112°-115°. Для модели 1,7-ди(циклотриалюмоксандиол)тетраалюмоксантетраол-1,3,5,7 Al-O-Al, O-Al-O и Al-O-H находятся в интервалах, соответственно, 132°-

138°, 117°-123° и 111°-113° Применяя известную формулу $pK_a = 47.74 - 154.949 [4 - 6]$ ($= +0.24$ и $+0.22$ - максимальные заряды на атомах водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности см. табл.1-3, находим значения кислотной силы равные $pK_a = 10.6$ и 13.6 соответственно. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 и 1,7-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксан-тетраол-1,3,5,7 методом AM1. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценены их кислотные силы $pK_a = 10.6$ и 13.6 соответственно. Установлено, что 3,5-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксантетраол-1,1,7,7 и 1,7-ди(цикло-триалюмоксандиол)тетраалюмоксан-тетраол-1,3,5,7 относятся к классу слабых Н-кислот (1114)