

Квантовохимический расчет молекул ряда линейных гексогонов в рамках молекулярных моделей графенов, открытых Геймом и Новоселовым в 2004г [1-2], состоящих из 1,2,3,4,5,6 циклов был выполнен в работах [3-5], методом MNDO. Для установления различных закономерностей в зависимости от количества гексогонов логично выполнить квантовохимические расчеты этим же методом моделей состоящих из 8,9 циклов т.е. октацена, наноцена и более. В связи с этим целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул октацена, наноцена в рамках молекулярных моделей графенов методом MNDO с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом встроенным в PC GAMESS[6], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка их кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt[7]. Результаты расчетов и дискуссия

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул октацена, наноцена получено методом MNDO и показано на рис.1,2 и в табл.1-3. Применяя формулу [8-9] $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{max} H^+$ (где $q_{max} H^+ = +0.06$ максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности) ,с успехом используемую, например в работах [10-19] , находим значение кислотной силы этих соединений $pK_a = 33$. Необходимо отметить, что с увеличением количества гексогонов от 1 до 8 количество одинарных углеродных связей возросло с 6 до 17, полуторных с 6 до 20 , а количество двойных связей во всех моделях не изменяется и равно 4 [3-5]. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул октацена, наноцена в рамках молекулярной модели графенов методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 33$. Установлено, что молекулы этих графенов обладают одинаковой кислотной силой и относится к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). При этом увеличение количества гексогонов в ряду изучаемых линейных графенов [3-5] не меняет их кислотную силу. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы октацена. ($E_0 = -446127$ кДж/моль, $E_{эл} = -3645295$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы октацена

Длины связей R, А	Валентные углы Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
1 2 3 4 5 6	C(1)-C(2) 1.47	C(3)-C(2)-C(1) 118	C(1) -0.04
C(2)-C(3) 1.47	C(14)-C(11)-C(1) 123	C(2) -0.04	C(3)-C(4) 1.36
C(4)-C(3)-C(2) 122	C(3) -0.04	C(4)-C(5) 1.45	C(11)-C(1)-C(2) 119
C(4) -0.06	C(5)-C(6) 1.36	C(5)-C(4)-C(3) 121	C(5) -0.06
C(6)-C(1) 1.47	C(12)-C(2)-C(3) 123	C(6) -0.04	H(7)-C(3) 1.09
C(6)-C(5)-C(4) 121	H(7) 0.06	H(8)-C(4) 1.09	C(1)-C(6)-C(5) 122
H(8) 0.06	H(9)-C(5) 1.09	C(2)-C(1)-C(6) 118	H(9) 0.06
H(10)-C(6) 1.09	C(11)-C(1)-C(6) 123	H(10) 0.06	C(11)-C(14) 1.45
C(4)-C(3)-H(7) 120	C(11) -0.02	C(11)-C(1) 1.38	C(5)-C(4)-H(8) 118
C(12) -0.02	C(12)-C(2) 1.38	C(6)-C(5)-H(9) 121	C(13) -0.04
C(13)-C(12) 1.45	C(1)-C(6)-H(10) 118	C(14) -0.04	C(14)-C(13) 1.46
C(13)-C(14)-C(11) 118	H(15) 0.06	H(15)-C(12) 1.09	

C(17)-C(14)-C(11) 123 H(16) 0.06 H(16)-C(11) 1.09 C(1)-C(2)-C(12) 119 C(17) -0.02
 C(17)-C(18) 1.44 C(20)-C(13)-C(12) 123 C(18) -0.04 C(17)-C(14) 1.39 C(2)-C(12)-C(13)
 123 C(19) -0.04 C(18)-C(19) 1.45 C(17)-C(14)-C(13) 119 C(20) -0.02 C(19)-C(20) 1.44
 C(12)-C(13)-C(14) 118 H(21) 0.06 C(20)-C(13) 1.39 C(18)-C(17)-C(14) 122 H(22) 0.06
 H(21)-C(17) 1.09 C(2)-C(12)-H(15) 120 C(23) -0.02 H(22)-C(20) 1.09 C(14)-C(11)-H(16)
 117 C(24) -0.04 C(23)-C(24) 1.43 C(19)-C(18)-C(17) 118 C(25) -0.04 C(23)-C(18) 1.40
 C(23)-C(18)-C(17) 123 C(26) -0.02 Окончание табл. 1 1 2 3 4 5 6 C(24)-C(25) 1.45
 C(20)-C(19)-C(18) 118 H(27) 0.06 C(25)-C(26) 1.43 C(24)-C(23)-C(18) 122 H(28) 0.06
 C(26)-C(19) 1.40 C(13)-C(20)-C(19) 122 C(29) -0.02 H(27)-C(26) 1.09 C(23)-C(18)-
 C(19) 119 C(30) -0.02 H(28)-C(23) 1.09 C(14)-C(13)-C(20) 119 C(31) -0.04 C(29)-C(32)
 1.40 C(26)-C(19)-C(20) 123 C(32) -0.04 C(29)-C(24) 1.42 C(18)-C(17)-H(21) 118 H(33)
 0.06 C(30)-C(25) 1.42 C(13)-C(20)-H(22) 120 H(34) 0.06 C(31)-C(30) 1.40 C(25)-C(24)-
 C(23) 119 C(35) -0.02 C(32)-C(31) 1.45 C(29)-C(24)-C(23) 123 C(36) -0.04 H(33)-C(29)
 1.09 C(26)-C(25)-C(24) 119 C(37) -0.02 H(34)-C(30) 1.09 C(32)-C(29)-C(24) 122 C(38) -
 0.04 C(35)-C(31) 1.44 C(19)-C(26)-C(25) 122 H(39) 0.06 C(36)-C(35) 1.39 C(29)-C(24)-
 C(25) 119 H(40) 0.06 C(37)-C(38) 1.39 C(18)-C(19)-C(26) 119 C(41) -0.02 C(37)-C(32)
 1.44 C(30)-C(25)-C(26) 123 C(42) -0.04 C(38)-C(36) 1.46 C(19)-C(26)-H(27) 119 C(43) -
 0.04 H(39)-C(37) 1.09 C(24)-C(23)-H(28) 118 C(44) -0.02 H(40)-C(35) 1.09 C(31)-C(32)-
 C(29) 119 H(45) 0.06 C(41)-C(42) 1.38 C(37)-C(32)-C(29) 123 H(46) 0.06 C(41)-C(38)
 1.45 C(24)-C(25)-C(30) 119 C(47) -0.04 C(42)-C(43) 1.47 C(35)-C(31)-C(30) 123 C(48) -
 0.06 C(43)-C(44) 1.38 C(25)-C(30)-C(31) 122 C(49) -0.06 C(44)-C(36) 1.45 C(37)-C(32)-
 C(31) 118 C(50) -0.04 H(45)-C(44) 1.09 C(30)-C(31)-C(32) 119 H(51) 0.06 H(46)-C(41)
 1.09 C(38)-C(37)-C(32) 122 H(52) 0.06 C(47)-C(48) 1.36 C(32)-C(29)-H(33) 119 H(53)
 0.06 C(47)-C(42) 1.47 C(25)-C(30)-H(34) 118 H(54) 0.06 C(48)-C(49) 1.45 C(32)-C(31)-
 C(35) 118 C(49)-C(50) 1.36 C(44)-C(36)-C(35) 123 C(50)-C(43) 1.47 C(31)-C(35)-C(36)
 122 H(51)-C(50) 1.09 C(41)-C(38)-C(36) 118 H(52)-C(49) 1.09 C(36)-C(38)-C(37) 119
 H(53)-C(48) 1.09 C(41)-C(38)-C(37) 123 H(54)-C(47) 1.09 C(35)-C(36)-C(38) 119 C(42)-
 C(41)-C(38) 123 C(38)-C(37)-H(39) 120 C(31)-C(35)-H(40) 118 C(43)-C(42)-C(41) 119
 C(47)-C(42)-C(41) 121 C(44)-C(43)-C(42) 119 C(48)-C(47)-C(42) 122 C(36)-C(44)-C(43)
 123 C(47)-C(42)-C(43) 118 C(38)-C(36)-C(44) 118 C(50)-C(43)-C(44) 123 C(36)-C(44)-
 H(45) 117 C(42)-C(41)-H(46) 120 C(49)-C(48)-C(47) 121 C(50)-C(49)-C(48) 121 C(43)-
 C(50)-C(49) 122 C(42)-C(43)-C(50) 118 C(43)-C(50)-H(51) 118 C(50)-C(49)-H(52) 121
 C(49)-C(48)-H(53) 118 C(48)-C(47)-H(54) 120 Рис. 2 - Геометрическое и электронное
 строение молекулы наноцена. ($E_0 = -498116$ кДж/моль, $E_{эл} = -4238710$ кДж/моль)
 Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на
 атомах наноцена методом Длины связей R, А Валентные углы Град Атом Заряды
 на атомах молекулы 1 2 3 4 5 6 C(1)-C(2) 1.47 C(3)-C(2)-C(1) 118 C(1) -0.04 C(2)-
 C(3) 1.46 C(12)-C(9)-C(1) 122 C(2) -0.04 C(3)-C(4) 1.38 C(4)-C(3)-C(2) 123 C(3) -0.02
 C(4)-C(5) 1.48 C(9)-C(1)-C(2) 119 C(4) -0.04 C(5)-C(6) 1.38 C(5)-C(4)-C(3) 119 C(5) -
 0.04 C(6)-C(1) 1.46 C(10)-C(2)-C(3) 123 C(6) -0.02 H(7)-C(3) 1.09 C(6)-C(5)-C(4) 119
 H(7) 0.06 H(8)-C(6) 1.09 C(54)-C(53)-C(4) 122 H(8) 0.06 C(9)-C(12) 1.45 C(1)-C(6)-C(5)

123 C(9) -0.02 C(9)-C(1) 1.38 C(53)-C(4)-C(5) 118 C(10) -0.02 C(10)-C(2) 1.38 C(2)-
C(1)-C(6) 118 C(11) -0.04 C(11)-C(10) 1.45 C(9)-C(1)-C(6) 123 C(12) -0.04 C(12)-C(11)
1.46 C(4)-C(3)-H(7) 120 H(13) 0.06 H(13)-C(10) 1.38 C(1)-C(6)-H(8) 117 H(14) 0.06
H(14)-C(9) 1.45 C(11)-C(12)-C(9) 118 C(15) -0.02 C(15)-C(16) 1.43 C(15)-C(12)-C(9)
123 C(16) -0.04 C(15)-C(12) 1.40 C(1)-C(2)-C(10) 119 C(17) -0.04 C(16)-C(17) 1.45
C(18)-C(11)-C(10) 123 C(18) -0.02 C(17)-C(18) 1.43 C(2)-C(10)-C(11) 122 H(19) 0.06
C(18)-C(11) 1.40 C(15)-C(12)-C(11) 119 H(20) 0.06 H(19)-C(15) 1.09 C(10)-C(11)-C(12)
118 C(21) -0.02 H(20)-C(18) 1.09 C(16)-C(15)-C(12) 122 C(22) -0.04 C(21)-C(22) 1.41
C(2)-C(10)-H(13) 120 C(23) -0.04 C(21)-C(16) 1.41 C(12)-C(9)-H(14) 117 C(24) -0.02
C(22)-C(23) 1.45 C(17)-C(16)-C(15) 119 H(25) 0.06 C(23)-C(24) 1.41 C(21)-C(16)-C(15)
123 H(26) 0.06 C(24)-C(17) 1.41 C(18)-C(17)-C(16) 119 C(27) -0.02 H(25)-C(24) 1.09
C(22)-C(21)-C(16) 122 C(28) -0.02 H(26)-C(21) 1.09 C(11)-C(18)-C(17) 122 C(29) -0.04
C(27)-C(30) 1.40 C(21)-C(16)-C(17) 119 C(30) -0.04 C(27)-C(22) 1.43 C(12)-C(11)-C(18)
119 H(31) 0.06 C(28)-C(23) 1.43 C(24)-C(17)-C(18) 123 H(32) 0.06 C(29)-C(28) 1.40
C(16)-C(15)-H(19) 118 C(33) -0.02 C(30)-C(29) 1.46 C(11)-C(18)-H(20) 120 C(34) -0.04
H(31)-C(27) 1.09 C(23)-C(22)-C(21) 119 C(35) -0.02 H(32)-C(28) 1.09 C(27)-C(22)-
C(21) 123 C(36) -0.04 C(33)-C(29) 1.45 C(24)-C(23)-C(22) 119 H(37) 0.06 C(34)-C(33)
1.38 C(30)-C(27)-C(22) 122 H(38) 0.06 C(35)-C(36) 1.38 C(17)-C(24)-C(23) 122 C(39) -
0.02 C(35)-C(30) 1.45 C(27)-C(22)-C(23) 119 C(40) -0.04 C(36)-C(34) 1.47 C(16)-C(17)-
C(24) 119 C(41) -0.04 H(37)-C(35) 1.09 C(28)-C(23)-C(24) 123 C(42) -0.02 H(38)-C(33)
1.09 C(17)-C(24)-H(25) 119 H(43) 0.06 C(39)-C(40) 1.38 C(22)-C(21)-H(26) 119 H(44)
0.06 C(39)-C(36) 1.46 C(29)-C(30)-C(27) 119 C(45) -0.04 C(40)-C(41) 1.48 C(35)-C(30)-
C(27) 123 C(46) -0.06 C(41)-C(42) 1.38 C(22)-C(23)-C(28) 119 C(47) -0.06 C(42)-C(34)
1.46 C(33)-C(29)-C(28) 123 C(48) -0.04 H(43)-C(42) 1.09 C(23)-C(28)-C(29) 122 H(49)
0.06 H(44)-C(39) 1.09 C(35)-C(30)-C(29) 118 H(50) 0.06 C(45)-C(46) 1.36 C(28)-C(29)-
C(30) 119 H(51) 0.06 C(45)-C(40) 1.47 C(36)-C(35)-C(30) 122 H(52) 0.06 C(46)-C(47)
1.45 C(30)-C(27)-H(31) 120 C(53) -0.04 C(47)-C(48) 1.36 C(23)-C(28)-H(32) 118 C(54) -
0.06 C(48)-C(41) 1.47 C(30)-C(29)-C(33) 118 C(55) -0.06 H(49)-C(48) 1.09 C(42)-C(34)-
C(33) 123 C(56) -0.04 H(50)-C(47) 1.09 C(29)-C(33)-C(34) 122 H(57) 0.06 H(51)-C(46)
1.09 C(39)-C(36)-C(34) 118 H(58) 0.06 H(52)-C(45) 1.09 C(34)-C(36)-C(35) 119 H(59)
0.06 C(53)-C(54) 1.36 C(39)-C(36)-C(35) 123 H(60) 0.06 C(53)-C(4) 1.47 C(33)-C(34)-
C(36) 119 C(54)-C(55) 1.45 C(40)-C(39)-C(36) 123 C(55)-C(56) 1.36 C(36)-C(35)-H(37)
120 C(56)-C(5) 1.47 C(29)-C(33)-H(38) 118 H(57)-C(53) 1.09 C(41)-C(40)-C(39) 119
H(58)-C(56) 1.09 C(45)-C(40)-C(39) 123 H(59)-C(55) 1.09 C(42)-C(41)-C(40) 119 H(60)-
C(54) 1.09 C(46)-C(45)-C(40) 122 C(34)-C(42)-C(41) 123 C(45)-C(40)-C(41) 118 C(36)-
C(34)-C(42) 118 C(48)-C(41)-C(42) 123 C(34)-C(42)-H(43) 117 C(40)-C(39)-H(44) 120
C(47)-C(46)-C(45) 121 Окончание табл. 2 1 2 3 4 5 6 C(48)-C(47)-C(46) 121 C(41)-
C(48)-C(47) 122 C(40)-C(41)-C(48) 118 C(41)-C(48)-H(49) 118 C(48)-C(47)-H(50) 121
C(47)-C(46)-H(51) 118 C(46)-C(45)-H(52) 120 C(55)-C(54)-C(53) 121 C(3)-C(4)-C(53)
123 C(56)-C(55)-C(54) 121 C(5)-C(56)-C(55) 122 C(4)-C(5)-C(56) 118 C(6)-C(5)-C(56)
123 C(54)-C(53)-H(57) 120 C(5)-C(56)-H(58) 118 C(56)-C(55)-H(59) 121 C(55)-C(54)-

Н(60) 118 Таблица 3 - Общая энергия(E_0), электронная энергия ($E_{эл}$), максимальный заряд на атоме водорода ($q_{max}H^+$), универсальный показатель кислотности (pK_a) молекул октацена, наноцена Молекулы - E_0 кДж/моль $q_{max}H^+$ pK_a Октацена -446127 +0.06 33 Наноцена -498116 +0.06 33