

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 относятся 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,Å	Валентные углы Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
1.47	C(1)-C(2)	118	
1.47	C(2)-C(3)	122	-0.04
1.45	C(3)-C(4)	121	-0.04
1.47	C(4)-C(5)	121	-0.06
1.36	C(5)-C(6)	122	-0.06
1.36	C(6)-C(7)	122	0.06
1.36	C(7)-C(8)	122	0.06
1.36	C(8)-C(9)	122	0.06
1.36	C(9)-C(10)	122	0.06
1.36	C(10)-C(11)	122	0.06
1.36	C(11)-C(12)	122	0.06
1.36	C(12)-C(13)	122	0.06
1.36	C(13)-C(14)	122	0.06
1.36	C(14)-C(15)	122	0.06
1.36	C(15)-C(16)	122	0.06
1.36	C(16)-C(17)	122	0.06
1.36	C(17)-C(18)	122	0.06
1.36	C(18)-C(19)	122	0.06
1.36	C(19)-C(20)	122	0.06
1.36	C(20)-C(21)	122	0.06
1.36	C(21)-C(22)	122	0.06
1.36	C(22)-C(23)	122	0.06
1.36	C(23)-C(24)	122	0.06
1.36	C(24)-C(25)	122	0.06
1.36	C(25)-C(26)	122	0.06
1.36	C(26)-C(27)	122	0.06
1.36	C(27)-C(28)	122	0.06
1.36	C(28)-C(29)	122	0.06
1.36	C(29)-C(30)	122	0.06
1.36	C(30)-C(31)	122	0.06
1.36	C(31)-C(32)	122	0.06
1.36	C(32)-C(33)	122	0.06
1.36	C(33)-C(34)	122	0.06
1.36	C(34)-C(35)	122	0.06
1.36	C(35)-C(36)	122	0.06
1.36	C(36)-C(37)	122	0.06
1.36	C(37)-C(38)	122	0.06
1.36	C(38)-C(39)	122	0.06
1.36	C(39)-C(40)	122	0.06
1.36	C(40)-C(41)	122	0.06
1.36	C(41)-C(42)	122	0.06
1.36	C(42)-C(43)	122	0.06
1.36	C(43)-C(44)	122	0.06
1.36	C(44)-C(45)	122	0.06
1.36	C(45)-C(46)	122	0.06
1.36	C(46)-C(47)	122	0.06
1.36	C(47)-C(48)	122	0.06
1.36	C(48)-C(49)	122	0.06
1.36	C(49)-C(50)	122	0.06
1.36	C(50)-C(51)	122	0.06
1.36	C(51)-C(52)	122	0.06
1.36	C(52)-C(53)	122	0.06
1.36	C(53)-C(54)	122	0.06
1.36	C(54)-C(55)	122	0.06
1.36	C(55)-C(56)	122	0.06
1.36	C(56)-C(57)	122	0.06
1.36	C(57)-C(58)	122	0.06
1.36	C(58)-C(59)	122	0.06
1.36	C(59)-C(60)	122	0.06
1.36	C(60)-C(61)	122	0.06
1.36	C(61)-C(62)	122	0.06
1.36	C(62)-C(63)	122	0.06
1.36	C(63)-C(64)	122	0.06
1.36	C(64)-C(65)	122	0.06
1.36	C(65)-C(66)	122	0.06
1.36	C(66)-C(67)	122	0.06
1.36	C(67)-C(68)	122	0.06
1.36	C(68)-C(69)	122	0.06
1.36	C(69)-C(70)	122	0.06
1.36	C(70)-C(71)	122	0.06
1.36	C(71)-C(72)	122	0.06
1.36	C(72)-C(73)	122	0.06
1.36	C(73)-C(74)	122	0.06
1.36	C(74)-C(75)	122	0.06
1.36	C(75)-C(76)	122	0.06
1.36	C(76)-C(77)	122	0.06
1.36	C(77)-C(78)	122	0.06
1.36	C(78)-C(79)	122	0.06
1.36	C(79)-C(80)	122	0.06
1.36	C(80)-C(81)	122	0.06
1.36	C(81)-C(82)	122	0.06
1.36	C(82)-C(83)	122	0.06
1.36	C(83)-C(84)	122	0.06
1.36	C(84)-C(85)	122	0.06
1.36	C(85)-C(86)	122	0.06
1.36	C(86)-C(87)	122	0.06
1.36	C(87)-C(88)	122	0.06
1.36	C(88)-C(89)	122	0.06
1.36	C(89)-C(90)	122	0.06
1.36	C(90)-C(91)	122	0.06
1.36	C(91)-C(92)	122	0.06
1.36	C(92)-C(93)	122	0.06
1.36	C(93)-C(94)	122	0.06
1.36	C(94)-C(95)	122	0.06
1.36	C(95)-C(96)	122	0.06
1.36	C(96)-C(97)	122	0.06
1.36	C(97)-C(98)	122	0.06
1.36	C(98)-C(99)	122	0.06
1.36	C(99)-C(100)	122	0.06
1.36	C(100)-C(101)	122	0.06
1.36	C(101)-C(102)	122	0.06
1.36	C(102)-C(103)	122	0.06
1.36	C(103)-C(104)	122	0.06
1.36	C(104)-C(105)	122	0.06
1.36	C(105)-C(106)	122	0.06
1.36	C(106)-C(107)	122	0.06
1.36	C(107)-C(108)	122	0.06
1.36	C(108)-C(109)	122	0.06
1.36	C(109)-C(110)	122	0.06
1.36	C(110)-C(111)	122	0.06
1.36	C(111)-C(112)	122	0.06
1.36	C(112)-C(113)	122	0.06
1.36	C(113)-C(114)	122	0.06
1.36	C(114)-C(115)	122	0.06
1.36	C(115)-C(116)	122	0.06
1.36	C(116)-C(117)	122	0.06
1.36	C(117)-C(118)	122	0.06
1.36	C(118)-C(119)	122	0.06
1.36	C(119)-C(120)	122	0.06
1.36	C(120)-C(121)	122	0.06
1.36	C(121)-C(122)	122	0.06
1.36	C(122)-C(123)	122	0.06
1.36	C(123)-C(124)	122	0.06
1.36	C(124)-C(125)	122	0.06
1.36	C(125)-C(126)	122	0.06
1.36	C(126)-C(127)	122	0.06
1.36	C(127)-C(128)	122	0.06
1.36	C(128)-C(129)	122	0.06
1.36	C(129)-C(130)	122	0.06
1.36	C(130)-C(131)	122	0.06
1.36	C(131)-C(132)	122	0.06
1.36	C(132)-C(133)	122	0.06
1.36	C(133)-C(134)	122	0.06
1.36	C(134)-C(135)	122	0.06
1.36	C(135)-C(136)	122	0.06
1.36	C(136)-C(137)	122	0.06
1.36	C(137)-C(138)	122	0.06
1.36	C(138)-C(139)	122	0.06
1.36	C(139)-C(140)	122	0.06
1.36	C(140)-C(141)	122	0.06
1.36	C(141)-C(142)	122	0.06
1.36	C(142)-C(143)	122	0.06
1.36	C(143)-C(144)	122	0.06
1.36	C(144)-C(145)	122	0.06
1.36	C(145)-C(146)	122	0.06
1.36	C(146)-C(147)	122	0.06
1.36	C(147)-C(148)	122	0.06
1.36	C(148)-C(149)	122	0.06
1.36	C(149)-C(150)	122	0.06
1.36	C(150)-C(151)	122	0.06
1.36	C(151)-C(152)	122	0.06
1.36	C(152)-C(153)	122	0.06
1.36	C(153)-C(154)	122	0.06
1.36	C(154)-C(155)	122	0.06
1.36	C(155)-C(156)	122	0.06
1.36	C(156)-C(157)	122	0.06
1.36	C(157)-C(158)	122	0.06
1.36	C(158)-C(159)	122	0.06
1.36	C(159)-C(160)	122	0.06
1.36	C(160)-C(161)	122	0.06
1.36	C(161)-C(162)	122	0.06
1.36	C(162)-C(163)	122	0.06
1.36	C(163)-C(164)	122	0.06
1.36	C(164)-C(165)	122	0.06
1.36	C(165)-C(166)	122	0.06
1.36	C(166)-C(167)	122	0.06
1.36	C(167)-C(168)	122	0.06
1.36	C(168)-C(169)	122	0.06
1.36	C(169)-C(170)	122	0.06
1.36	C(170)-C(171)	122	0.06
1.36	C(171)-C(172)	122	0.06
1.36	C(172)-C(173)	122	0.06
1.36	C(173)-C(174)	122	0.06
1.36	C(174)-C(175)	122	0.06
1.36	C(175)-C(176)	122	0.06
1.36	C(176)-C(177)	122	0.06
1.36	C(177)-C(178)	122	0.06
1.36	C(178)-C(179)	122	0.06
1.36	C(179)-C(180)	122	0.06
1.36	C(180)-C(181)	122	0.06
1.36	C(181)-C(182)	122	0.06
1.36	C(182)-C(183)	122	0.06
1.36	C(183)-C(184)	122	0.06
1.36	C(184)-C(185)	122	0.06
1.36	C(185)-C(186)	122	0.06
1.36	C(186)-C(187)	122	0.06
1.36	C(187)-C(188)	122	0.06
1.36	C(188)-C(189)	122	0.06
1.36	C(189)-C(190)	122	0.06
1.36	C(190)-C(191)	122	0.06
1.36	C(191)-C(192)	122	0.06
1.36	C(192)-C(193)	122	0.06
1.36	C(193)-C(194)	122	0.06
1.36	C(194)-C(195)	122	0.06
1.36	C(195)-C(196)	122	0.06
1.36	C(196)-C(197)	122	0.06
1.36	C(197)-C(198)	122	0.06
1.36	C(198)-C(199)	122	0.06
1.36	C(199)-C(200)	122	0.06
1.36	C(200)-C(201)	122	0.06
1.36	C(201)-C(202)	122	0.06
1.36	C(202)-C(203)	122	0.06
1.36	C(203)-C(204)	122	0.06
1.36	C(204)-C(205)	122	0.06
1.36	C(205)-C(206)	122	0.06
1.36	C(206)-C(207)	122	0.06
1.36	C(207)-C(208)	122	0.06
1.36	C(208)-C(209)	122	0.06
1.36	C(209)-C(210)	122	0.06
1.36	C(210)-C(211)	122	0.06
1.36	C(211)-C(212)	122	0.06
1.36	C(212)-C(213)	122	0.06
1.36	C(213)-C(214)	122	0.06
1.36	C(214)-C(215)	122	0.06
1.36	C(215)-C(216)	122	0.06
1.36	C(216)-C(217)	122	0.06
1.36	C(217)-C(218)	122	0.06
1.36	C(218)-C(219)	122	0.06
1.36	C(219)-C(220)	122	0.06
1.36	C(220)-C(221)	122	0.06
1.36	C(221)-C(222)	122	0.06
1.36	C(222)-C(223)	122	0.06
1.36	C(223)-C(224)	122	0.06
1.36	C(224)-C(225)	122	0.06
1.36	C(225)-C(226)	122	0.06
1.36	C(226)-C(		

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. (E0= -498116 кДж/моль, Eэл= -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 (Еэл), максимальный заряд на атоме водорода ( $q_{\max}H^+$ ), универсальный показатель кислотности (pKa) молекул октацена, наноцена Молекулы - $E_0$  кДж/моль  $q_{\max}H^+$  pKa Октацена -446127 +0.06 33 Наноцена -498116 +0.06 33