

Цель и методическая часть работы Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекул 1-(тетрациклоалюмоксантриол)диалюмоксантриол; 1-(тетрациклоалюмоксантриол),2-оксинатрий и 1-(тетрациклоалюмоксантриол),1-оксинатрий) методом MNDO в рамках молекулярной модели с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [2], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка их кислотной силы. Данные соединения могут являться фрагментами классических моделей оптического стекла, таких как «лёгкий крон», «тяжёлый флинт» и др., как в рамках полимерной модели Менделеева, так и в рамках современной тетраэдрических моделей [1]. Для визуального представления моделей молекул использовалась известная программа MacMolPlt [3]. Результаты расчетов Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекул тетрациклоалюмоксантриолов получены методом MNDO и показаны на рис. 1-3 и в табл. 1-4. Применяя известную формулу $pK_a = 42.11 - 147.18 q_{\max} H^+$ [4] ($q_{\max} H^+ = +0.18 - 0.19$ - максимальный заряд на атоме водорода, pK_a - универсальный показатель кислотности, см. табл.1), которая с успехом используется, например, в работах [5-7], находим значение кислотной силы, равное $pK_a = 14-16$. Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекул 1-(тетрациклоалюмоксантриол)диалюмоксантриол;1-(тетрациклоалюмоксантриол),2-оксинатрий и 1-(тетрациклоалюмоксантриол),1-оксинатрий методом MNDO. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этих соединений. Теоретически оценена их кислотная сила $pK_a = 14-16$. Установлено, что тетрацикло-алюмоксантриолы обладают одинаковой кислотной силой, и относятся к классу очень слабых Н-кислот ($pK_a > 14$). Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1-(тетрациклоалюмоксантриол)диалю-моксантриол. ($E_0 = -411374$ кДж/моль, $E_{эл} = -1712476$ кДж/моль) Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1-(тетрациклоалюмоксантриол)-диалюмоксантриол

Длины связей R, Å	Валентные углы Град	1	2	3	4	O(2)-AL(1)	1.63
AL(1)-O(2)-AL(3)	177	AL(3)-O(2)	1.63	O(2)-AL(3)-O(4)	122	O(4)-AL(3)	1.65
AL(3)-O(4)-AL(5)	152	AL(5)-O(4)	1.64	O(4)-AL(5)-O(6)	118	O(6)-AL(5)	1.64
AL(13)-O(14)-AL(7)	152	AL(7)-O(14)	1.65	O(14)-AL(7)-O(8)	117	O(8)-AL(7)	1.64
O(4)-AL(5)-O(9)	122	O(9)-AL(5)	1.68	O(14)-AL(7)-O(10)	121	O(10)-AL(7)	1.67
O(2)-AL(1)-O(11)	119	O(11)-AL(1)	1.68	O(2)-AL(1)-O(12)	122	O(12)-AL(1)	1.64
AL(5)-O(6)-AL(13)	153	AL(13)-O(6)	1.65	O(6)-AL(13)-O(14)	117	O(14)-AL(13)	1.64
O(6)-AL(13)-O(15)	122	O(15)-AL(13)	1.67	AL(1)-O(12)-AL(16)	178	AL(16)-O(12)	1.62
O(12)-AL(16)-O(17)	120	O(17)-AL(16)	1.68	O(12)-AL(16)-O(18)	119	O(18)-AL(16)	1.68
AL(5)-O(9)-H(19)	122	H(19)-O(9)	0.93	AL(7)-O(10)-H(20)	122	H(20)-O(10)	0.93
AL(1)-O(11)-H(21)	123	H(21)-O(11)	0.93	AL(13)-O(15)-H(22)	122	H(22)-O(15)	0.93
AL(16)-O(17)-H(23)	124	H(23)-O(17)	0.93				

O(17) 0.93 AL(16)-O(18)-H(24) 124 H(24)-O(18) 0.93 Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1-(тетрациклоалюмоксантриол),2-оксинатрий. (E0= -410356 кДж/моль, Eэл= -1725664 кДж/моль) Таблица 2 -

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1-(тетрациклоалюмоксантриол),2-оксинатрий Длины связей R,Å Валентные углы Град O(2)-AL(1) 1.65 AL(1)-O(2)-AL(3) 174 AL(3)-O(2) 1.61 O(2)-AL(3)-O(4) 125 O(4)-AL(3) 1.65 AL(3)-O(4)-AL(5) 156 AL(5)-O(4) 1.64 O(4)-AL(5)-O(6) 117 O(6)-AL(5) 1.65 O(6)-AL(13)-AL(7) 102 AL(7)-AL(13) 3.18 AL(13)-AL(7)-O(8) 106 O(8)-AL(7) 1.63 O(4)-AL(5)-O(9) 123 O(9)-AL(5) 1.67 AL(13)-AL(7)-O(10) 136 O(10)-AL(7) 1.69 O(2)-AL(1)-O(11) 117 O(11)-AL(1) 1.69 O(2)-AL(1)-O(12) 121 O(12)-AL(1) 1.61 AL(5)-O(6)-AL(13) 153 AL(13)-O(6) 1.64 AL(13)-AL(7)-O(14) 15 O(14)-AL(7) 1.64 O(6)-AL(13)-O(15) 123 O(15)-AL(13) 1.67 AL(1)-O(12)-AL(16) 167 AL(16)-O(12) 1.67 O(12)-AL(16)-O(17) 113 O(17)-AL(16) 1.71 O(12)-AL(16)-O(18) 121 O(18)-AL(16) 1.59 AL(5)-O(9)-H(19) 122 H(19)-O(9) 0.93 AL(7)-O(10)-H(20) 120 H(20)-O(10) 0.93 AL(1)-O(11)-H(21) 121 H(21)-O(11) 0.93 AL(13)-O(15)-H(22) 122 H(22)-O(15) 0.93 AL(16)-O(17)-H(23) 117 H(23)-O(17) 0.93 AL(16)-O(18)-NA(24) 149 NA(24)-O(18) 2.23 174 Рис. 3 - Геометрическое и электронное строение молекулы 1-(тетрациклоалюмоксантриол),1-оксинатрий. (E0=-410319 кДж/моль, Eэл=-1703166 кДж/моль) Таблица 3 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 1-

(тетрациклоалюмоксантриол),1-оксинатрий Длины связей R,Å Валентные углы Град O(2)-AL(1) 1.65 AL(1)-O(2)-AL(3) 178 AL(3)-O(2) 1.61 O(2)-AL(3)-O(4) 123 O(4)-AL(3) 1.66 AL(3)-O(4)-AL(5) 154 AL(5)-O(4) 1.64 O(4)-AL(5)-O(6) 119 O(6)-AL(5) 1.65 AL(13)-O(14)-AL(7) 151 AL(7)-O(14) 1.65 O(14)-AL(7)-O(8) 118 O(8)-AL(7) 1.63 O(4)-AL(5)-O(9) 122 O(9)-AL(5) 1.68 O(14)-AL(7)-O(10) 120 O(10)-AL(7) 1.68 O(2)-AL(1)-O(11) 129 O(11)-AL(1) 1.59 O(2)-AL(1)-O(12) 114 O(12)-AL(1) 1.69 AL(5)-O(6)-AL(13) 151 AL(13)-O(6) 1.65 O(6)-AL(13)-O(14) 118 O(14)-AL(13) 1.64 O(6)-AL(13)-O(15) 121 O(15)-AL(13) 1.68 AL(1)-O(12)-AL(16) 161 AL(16)-O(12) 1.60 O(12)-AL(16)-O(17) 123 O(17)-AL(16) 1.68 O(12)-AL(16)-O(18) 119 O(18)-AL(16) 1.71 AL(5)-O(9)-H(19) 121 H(19)-O(9) 0.93 AL(7)-O(10)-H(20) 121 H(20)-O(10) 0.93 AL(1)-O(11)-NA(21) 136 NA(21)-O(11) 2.21 AL(13)-O(15)-H(22) 122 H(22)-O(15) 0.93 AL(16)-O(17)-H(23) 123 H(23)-O(17) 0.93 AL(16)-O(18)-H(24) 121 H(24)-O(18) 0.93 Таблица 4 - Общая энергия (E0), электронная энергия (Eэл), максимальный заряд на атоме водорода (qmaxH+) и универсальный показатель кислотности (pKa) молекул

тетрациклоалюмоксантриолов № Тетрациклоалюмоксантриол -E0 (kDg/mol) -Eэл (kDg/mol) qmaxH+ pKa 1 1-(тетрациклоалю-моксантриол)диалюмоксантриол - 411374 -1712476 0.19 14 2 1-(тетрациклоалю-моксантриол),2-оксинатрий -410356 -1725664 0.19 14 3 1-(тетрациклоалю-моксантриол),1-оксинатрий -410319 - 1703166 0.18 16