



УДК 547.854.83:544.183.25
ББК 24.5я7

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЫ 4-ДИФТОРМЕТОКСИ-2-ЭТИЛСУЛЬФАНИЛ-1,3- ДИГИДРОПИРИМИДИНА МЕТОДОМ АВ INITIO

В.А. Бабкин, Д.С. Андреев, В.Т. Фомичев, Е.С. Титова

В статье представлен впервые выполненный квантово-химический расчет молекулы 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидина методом АВ INITIO в базе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение. Дана теоретическая оценка кислотной силы этого соединения.

Ключевые слова: квантово-химический расчет, газовая фаза, метод АВ INITIO, 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидин, кислотная сила, универсальный показатель кислотности.

симальный заряд на атоме водорода, рКа – универсальный показатель кислотности; см. табл. 1) [13] с успехом применяемые, например, в работах [1–11; 13; 15], находим значение кислотной силы $pK_a = 30$.

Целью настоящей работы является квантово-химический расчет молекулы 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидина методом АВ INITIO в базе 6-311G** с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом, встроенным в PC GAMESS [14], в приближении изолированной молекулы в газовой фазе и теоретическая оценка его кислотной силы. Для визуального представления модели молекулы использовалась известная программа MacMolPlt [12].

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение, общая энергия и электронная энергия молекулы 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидина получены методом АВ INITIO в базе 6-311G** и показаны на рисунке 1 и в таблице 1. Используя известную формулу $pK_a = 49,04 - 134,61q_{\text{max}}^{\text{H}^+}$ ($q_{\text{max}}^{\text{H}^+} = +0,14$ – мак-

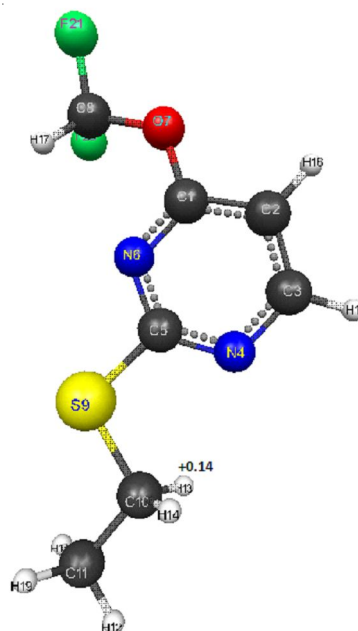


Рис. 1. Геометрическое и электронное строение молекулы 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидина ($E_0 = -2\,752\,131$ кДж/моль, $E_{\text{эл}} = -5\,120\,463$ кДж/моль)

Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы 2-этилтио-4-дифторметоксипиримидина

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
C(2)-C(1)	1,39	C(1)-C(2)-C(3)	115	C(1)	+0,52
C(3)-C(2)	1,37	C(2)-C(3)-N(4)	123	C(2)	-0,27
N(4)-C(3)	1,33	C(3)-N(4)-C(5)	116	C(3)	+0,18
C(5)-N(4)	1,31	C(1)-N(6)-C(5)	117	N(4)	-0,42
C(5)-N(6)	1,33	C(2)-C(1)-N(6)	123	C(5)	+0,25
N(6)-C(1)	1,30	C(2)-C(1)-O(7)	117	N(6)	-0,48
O(7)-C(1)	1,34	C(1)-O(7)-C(8)	120	O(7)	-0,42
C(8)-O(7)	1,37	N(4)-C(5)-S(9)	120	C(8)	+0,68
S(9)-C(5)	1,76	C(5)-S(9)-C(10)	103	S(9)	+0,13
C(10)-S(9)	1,82	S(9)-C(10)-C(11)	109	C(10)	-0,30
C(11)-C(10)	1,53	C(10)-C(11)-H(12)	109	C(11)	-0,26
H(12)-C(11)	1,09	S(9)-C(10)-H(13)	108	H(12)	+0,10
H(13)-C(10)	1,08	S(9)-C(10)-H(14)	109	H(13)	+0,14
H(14)-C(10)	1,08	C(2)-C(3)-H(15)	121	H(14)	+0,14
H(15)-C(3)	1,08	C(1)-C(2)-H(16)	122	H(15)	+0,13
H(16)-C(2)	1,07	O(7)-C(8)-H(17)	113	H(16)	+0,13
H(17)-C(8)	1,07	C(10)-C(11)-H(18)	111	H(17)	+0,10
H(18)-C(11)	1,09	C(10)-C(11)-H(19)	111	H(18)	+0,11
H(19)-C(11)	1,09	O(7)-C(8)-F(20)	110	H(19)	+0,10
F(20)-C(8)	1,32	O(7)-C(8)-F(21)	106	F(20)	-0,29
F(21)-C(8)	1,32	–	–	F(21)	-0,27

Таким образом, нами впервые выполнен квантово-химический расчет молекулы 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидин методом АВ INITIO в базе 6-311G**. Получено оптимизированное геометрическое и электронное строение этого соединения. Теоретически оценена его кислотная сила рKa = 30. Установлено, что 4-дифторметокси-2-этилсульфанил-1,3-дигидропиримидин относится к классу очень слабых Н-кислот (рKa>14).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилбутена-1 методом АВ INITIO / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 159–160.
 2. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилбутена-2 методом АВ INITIO / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 161–162.
 3. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилпентена-1 методом АВ INITIO / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев // Квантово-химический

расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 162–164.

4. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы 2-этилбутена-1 методом АВ INITIO / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 164–166.

5. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы изобутилена методом АВ INITIO / В. А. Бабкин, Д. С. Андреев // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 157–158.

6. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации гексен-1 / В. А. Бабкин, В. Ю. Дмитриев, Г. Е. Заиков // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 71–73.

7. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации гептен-1 / В. А. Бабкин, В. Ю. Дмитриев, Г. Е. Заиков // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 73–75.

8. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации декен-1 / В. А. Бабкин, В. Ю. Дмитриев, Г. Е. Заиков // Квантово-химический расчет уникальных моле-

кулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 75–77.

9. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации нонен-1 / В. А. Бабкин, В. Ю. Дмитриев, Г. Е. Заиков // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 78–80.

10. Бабкин, В. А. Квантово-химический расчет молекулы мономера катионной полимеризации октен-1 / В. А. Бабкин, В. Ю. Дмитриев, Г. Е. Заиков // Квантово-химический расчет уникальных молекулярных систем : сб. науч. ст. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2010. – Т. 1. – С. 81–83.

11. Квантово-химический расчет молекулы 2-метилтио-4-дифторметокси-пиримидина методом

AB INITIO / В. А. Бабкин [и др.] // Вестн. Казан. технол. ун-та. – 2012. – Т. 15, № 6. – С. 14–15.

12. Bode, B. M. J. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS / B. M. Bode, M. S. Gordon // J. Mol. Graphics Mod. – 1998. – № 16. – P. 133–138.

13. Connection of the universal acidity index of H-acid with the charge on hydrogen atom (AB INITIO method) / V. A. Babkin [et al.] // Oxidation communication. – 2002. – № 1 (25). – P. 21–47.

14. General Atomic and Molecular Electronic Structure Systems / M. W. Schmidt [et al.] // J. Comput. Chem. – 1993. – № 14. – P. 1347–1363.

15. Theoretical estimation acid force fluorine-containing pyrimidines / Babkin, V.A. [et al.] // Kinetics, catalysis and mechanism of Chemical reaction. – N. Y. : Nova, 2012. – P. 283–304.

QUANTUM AND CHEMICAL CALCULATION OF MOLECULE 4-DIFLUOROMETHOXY-2-ETHYLSULFANIL-1,3-DIHYDROPYRIMIDINE AB INITIO METHOD

V.A. Babkin, D.S. Andreev, V.T. Fomitchev, E.S. Titova

For the first time quantum chemical calculation of a molecule of 4-difluoromethoxy-2-ethylsulfanyl-1,3-dihydropyrimidine is executed by method AB INITIO with optimization of geometry on all parameters. The optimized geometrical and electronic structure of this compound is received. Acid force of 4-difluoromethoxy-2-ethylsulfanyl-1,3-dihydropyrimidine is theoretically appreciated.

Key words: *quantum chemical calculation, gas phase, method AB INITIO, 4-difluoromethoxy-2-ethylsulfanyl-1,3-dihydropyrimidine, acid strength, universal index of acidity.*