

УДК 547.538.141: 544.18

РАСЧЕТ МЕХАНИЗМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПЛЕКСНОГО КАТАЛИЗАТОРА $\text{HF}\cdot\text{BF}_3$ С П-МЕТИЛСТИРОЛОМ В ТОЛУОЛЕ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА 1:1:1 МЕТОДОМ *ab initio*

¹ В.А. Бабкин, ¹ Д. С. Андреев, ¹ А.В. Игнатов, ² В.С. Белоусова, ^{3,4} Е.С. Титова,
³ А.И. Рахимов, ⁵ В.Т. Фомичёв

¹ Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета,
403343 Волгоградская область, Михайловка, ул. Мичурина, 2,
e-mail: babkin_v.a@mail.ru

² Первый Московский государственный медицинский университет, имени И.М. Сеченова
119991, ул. Трубецкая, 8, корпус 2, desdemosha@mail.ru

³ Волгоградский государственный технический университет, 400005, Волгоград, проспект
Ленина, 28, e-mail: organic@vstu.ru

⁴ Волгоградский государственный медицинский университет, 40013, Волгоград,
пл. Павших Борцов, 1 e-mail: titova051@rambler.ru

⁵ Институт архитектуры и строительства ВолгГТУ, 400074, Волгоград, ул.
Академическая, 1

Аннотация: Впервые выполнено квантово-химическое изучение механизма инициирования мономера катионной полимеризации п-метилстирола в присутствии комплексного катализатора фторид бора – фтористый водород в толуоле стехиометрического состава 1:1:1 методом *ab initio*. Показано, что величина энергии активации этой реакции составляет 76 кДж/моль, а тепловой эффект равен 0 кДж/моль.

Ключевые слова: п-метилстирол, механизм инициирования, катализатор фторид бора – фтористый водород, толуол, тепловой эффект реакции, метод *ab initio*.

Введение

До настоящего времени остаётся неизученным целый ряд важных фундаментальных вопросов, касающихся механизмов элементарных актов катионной полимеризации п-метилстирола: инициирования, роста и обрыва цепи в присутствии комплексного катализатора $\text{BF}_3 \cdot \text{HF}$ в толуоле. Поэтому целью настоящей работы является изучение механизма инициирования п-метилстирола в присутствии этого комплексного катализатора

путем расчёта реакции взаимодействия мономера и инициатора вдоль координаты R_{C1-H20} в толуоле стехиометрического состава 1:1:1 (в рамках молекулярной модели).

Методическая часть

Изучался механизм инициирования мономера катионной полимеризации *n*-метилстирола в присутствии комплексного катализатора $BF_3 \cdot HF$ в толуоле со стехиометрическим составом смеси 1:1:1. В качестве координаты реакции было выбрано расстояние между атомами C(1) и H(20). Расчет выполнялся квантовохимическим методом *ab initio* RHF/6-311G** [1] с оптимизацией геометрии по всем параметрам градиентным методом, встроенным в программу Firefly [2], основанную на исходном коде GAMESS [1, 3]. Метод был выбран в связи с тем, что он достаточно точно позволяет рассчитать энергетические барьеры реакции и определить активные центры [3]. Расчеты выполнялись в приближении изолированной молекулы в толуоле в рамках молекулярной модели. Механизм инициирования *n*-метилстирола выполнялся по методике, подробно описанной в работе [4] и применённой в работах [5-8]. Для визуального представления молекулы использовалась программа MacMolPlt [9].

Результаты расчетов

Результаты расчетов изменения длин связей вдоль пути взаимодействия, валентных углов, зарядов на атомах молекулярной системы в процессе взаимодействия *n*-метилстирола и катализатора $BF_3 \cdot HF$ в толуоле стехиометрического состава 1:1:1 представлены в табл. 1-3.

На рис. 1 показано геометрическое и электронное строение исходной модели *n*-метилстирола. На рис. 2 представлена конечная структура взаимодействия катализатора с *n*-метилстиролом; на рис. 3 – энергетический профиль данного взаимодействия. На рис. 4 – изменение зарядов на атомах, непосредственно участвовавших во взаимодействии комплексного катализатора $HF \cdot BF_3$ с *n*-метилстиролом.

Атомы C(1), C(2), H(20), F(21) и B(22) непосредственно участвуют в стадии инициирования полимеризации. Проанализируем изменение зарядов на этих атомах вдоль выбранной координаты реакции.

На стадии координации (стадия 1-я, ступени 1-7) заряд на атоме C(1) меняется с -0,209 до -0,245, на стадии формирования активного центра АЦ (стадия 2-я, ступени 8-17) – с -0,257 до -0,351, на стадии формирования конечного продукта (стадия 3-я, ступени 18-21) – с -0,369 до -0,245.

На 1-й стадии заряд на атоме C(2) меняется с -0,174 до -0,178, на 2-й стадии – с -0,173 до -0,075, на 3-й стадии – с -0,022 до 0,110.

На стадии координации заряд на атоме H(20) меняется с 0,325 до 0,329, на стадии формирования АЦ – с 0,366 до 0,407, на стадии формирования конечного продукта – с 0,416 до 0,195.

На 1-й стадии заряд на атоме F(21) меняется с -0,334 до -0,351, на 2-й стадии – с -0,356 до -0,440, на 3-й стадии – с -0,441 до -0,472.

На стадии координации заряд на атоме В(22) меняется с 0,816 до 0,821, на стадии формирования АЦ – с 0,823 до 0,847, на стадии формирования конечного продукта – с 0,860 до 0,866.

Заряды на атоме толуола (C(26)-C(32) и H(33)-H(40)) вдоль координаты реакции менялись в следующих диапазонах: для C(26)-C(32) – от -0,175 до -0,172, для H(33)-H(40) – от 0,118 до 0,148. В процессе реакции происходит одновременный разрыв связей F(21)-H(20) и превращение C(1)-C(2) π -связи (двойной) в σ -связь (одинарную) и формирование новой связи – C(1)-H(20) и противоиона $[\text{BF}_3 \cdot \text{OH}]^-$ (рис. 2).

Рассчитанная величина энергия активации реакции составила 76 кДж/моль, а тепловой эффект – 0 кДж/моль.

Таким образом, изменение зарядов на атомах, поведение фрагментов реакции, разрыв и формирование новых связей в изучаемой реакции свидетельствуют о том, что она идёт по схеме согласованных взаимодействий.

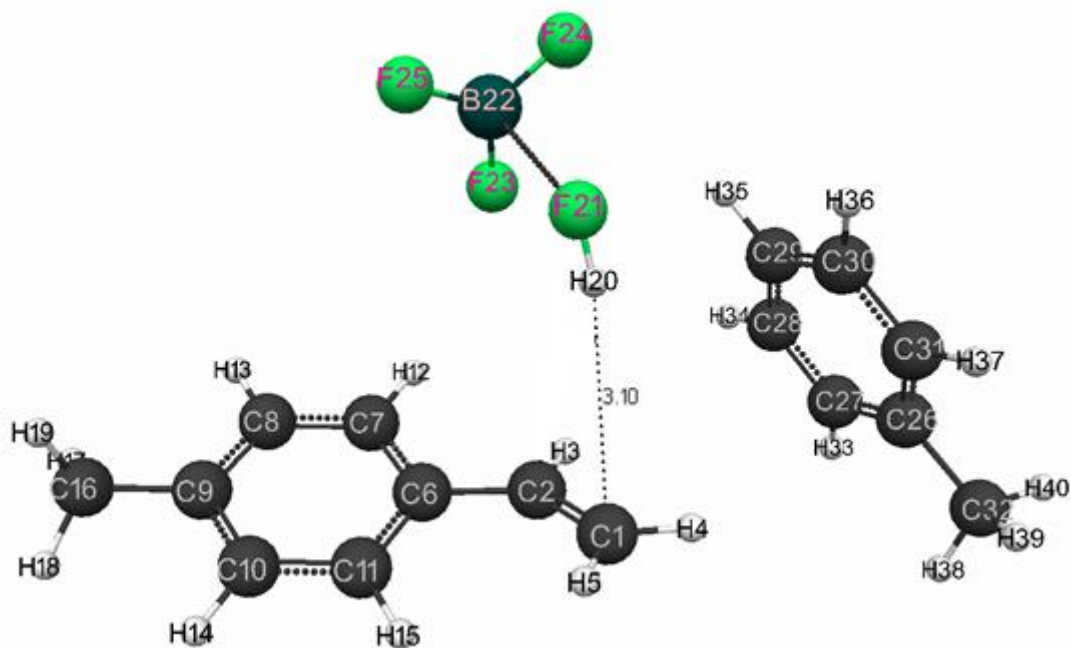


Рисунок 1. Структура исходной модели комплексного катализатора

HF·BF₃ с п-метилстиролом в толуоле стехиометрического состава 1:1:1.

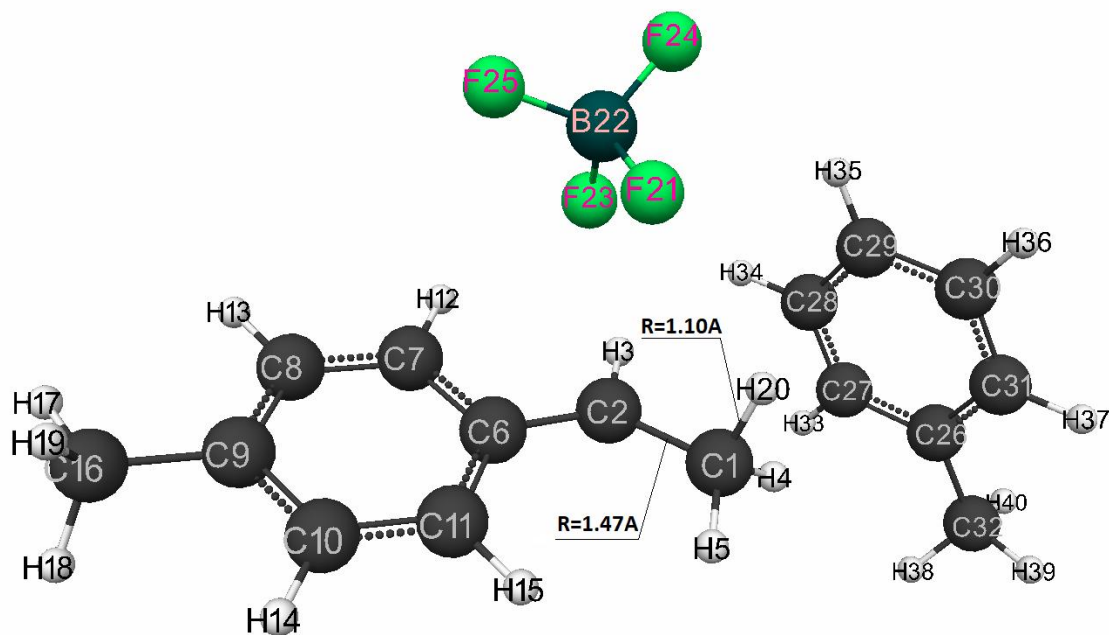


Рисунок 2. Конечная структура взаимодействия комплексного катализатора $H_2O·BF_3$ с п-метилстиролом в толуоле стехиометрического состава 1:1:1.

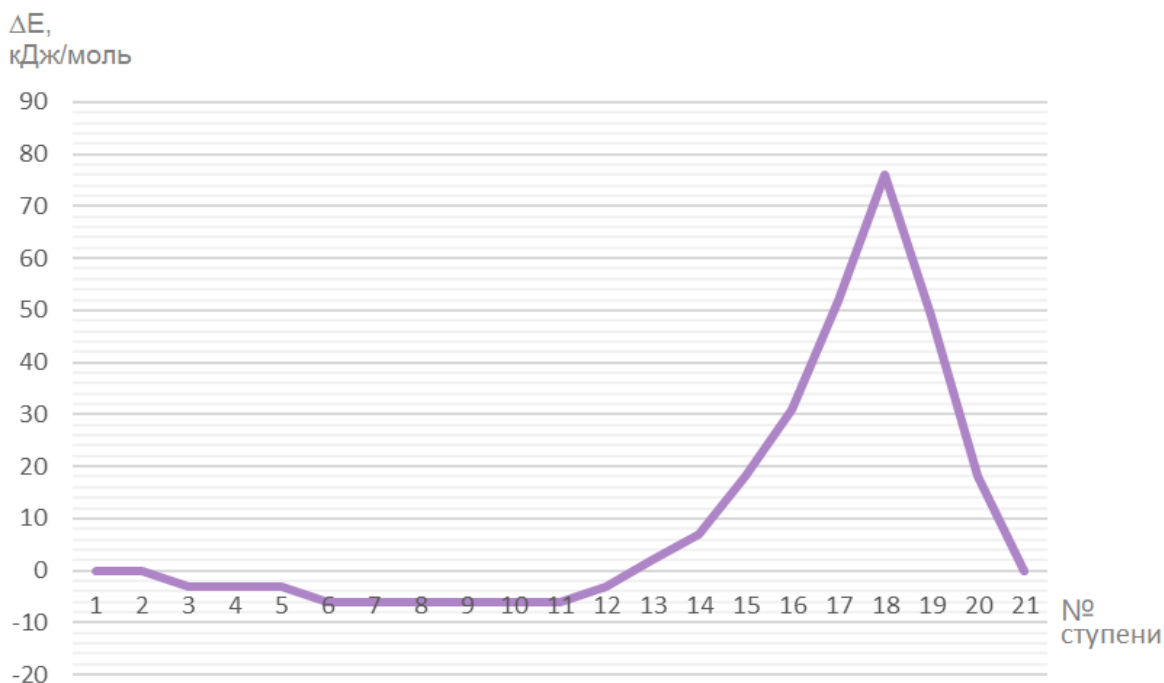


Рисунок 3. Изменение общей энергии (DE , кДж/моль) в процессе взаимодействия комплексного катализатора $H_2O·BF_3$ с п-метилстиролом в толуоле стехиометрического состава 1:1:1 (1-21 – ступени взаимодействия).

H(19)-C(16)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
H(20)-F(21)	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90	0,91	0,91	0,91	0,91
H(20)-C(1)	3,10	3,00	2,90	2,80	2,70	2,60	2,50	2,40	2,30	2,20
B(22)-F(21)	2,43	2,42	2,41	2,41	2,40	2,41	2,39	2,38	2,37	2,36
F(23)-B(22)	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,31	1,31	1,31	1,31	1,31
F(24)-B(22)	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30
F(25)-B(22)	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30
C(26)-C(31)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(27)-C(26)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(28)-C(27)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(29)-C(28)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38
C(30)-C(29)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(31)-C(30)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39
C(32)-C(26)	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51	1,51
H(33)-C(27)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(34)-C(28)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(35)-C(29)	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07	1,07
H(36)-C(30)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07
H(37)-C(31)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(38)-C(32)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(39)-C(32)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(40)-C(32)	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Продолжение Таблицы 1.

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C(2)-C(1)	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,34	1,46	1,47	1,47
H(3)-C(2)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07
H(4)-C(1)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
H(5)-C(1)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08
C(6)-C(11)	1,40	1,39	1,40	1,39	1,40	1,39	1,40	1,40	1,42	1,42	1,42
C(6)-C(2)	1,48	1,48	1,48	1,48	1,48	1,48	1,47	1,47	1,40	1,40	1,39
C(7)-C(6)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,41	1,41	1,41
C(8)-C(7)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38
C(9)-C(8)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
C(10)-C(9)	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,41	1,41	1,41
C(11)-C(10)	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,38	1,36	1,36	1,36
H(12)-C(7)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07
H(13)-C(8)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07
H(14)-C(10)	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07

C(11)-C(10)-C(9)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(12)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(13)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
H(14)-C(10)-C(9)	120	120	119	119	119	119	119	119	119	119
H(15)-C(11)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(16)-C(9)-C(8)	121	121	122	122	122	122	122	122	122	122
H(17)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(18)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(19)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(20)-F(21)-B(22)	123	123	122	122	123	122	122	122	122	122
H(20)-C(1)-C(2)	69	69	70	72	72	74	74	75	77	79
F(23)-B(22)-F(21)	91	91	91	91	91	91	91	91	91	91
F(24)-B(22)-F(21)	92	92	92	92	92	92	92	92	93	93
F(25)-B(22)-F(21)	94	94	94	94	94	94	94	94	94	94
C(26)-C(31)-C(30)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(27)-C(26)-C(31)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(28)-C(27)-C(26)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(29)-C(28)-C(27)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(30)-C(29)-C(28)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(31)-C(30)-C(29)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(32)-C(26)-C(31)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(33)-C(27)-C(26)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(34)-C(28)-C(27)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(35)-C(29)-C(28)	120	120	120	120	120	120	121	121	121	121
H(36)-C(30)-C(29)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(37)-C(31)-C(30)	119	119	119	119	119	120	119	119	119	119
H(38)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(39)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(40)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111

Продолжение Таблицы 2.

номер ступени	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
H(3)-C(2)-C(1)	118	118	118	118	118	118	118	117	115	115	116
H(4)-C(1)-C(2)	121	121	120	121	120	120	120	120	112	111	110
H(5)-C(1)-C(2)	122	122	123	122	122	122	122	122	117	116	115
C(6)-C(11)-C(10)	121	121	121	121	121	121	121	121	120	120	120
C(6)-C(2)-C(1)	127	127	127	127	127	127	127	128	128	128	128
C(7)-C(6)-C(11)	118	118	118	118	118	118	118	119	119	119	119
C(8)-C(7)-C(6)	121	121	121	121	121	121	121	121	120	120	120

C(9)-C(8)-C(7)	121	121	121	121	121	121	121	121	120	120	120
C(10)-C(9)-C(8)	118	118	118	118	118	118	118	118	120	120	120
C(11)-C(10)-C(9)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	120
H(12)-C(7)-C(6)	120	120	120	120	120	120	120	120	119	119	119
H(13)-C(8)-C(7)	119	119	119	119	119	119	119	119	120	120	120
H(14)-C(10)-C(9)	119	120	119	119	119	120	120	120	119	119	119
H(15)-C(11)-C(10)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	120	120
C(16)-C(9)-C(8)	122	122	122	122	122	121	121	121	121	121	121
H(17)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	112	112	112
H(18)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	110	110
H(19)-C(16)-C(9)	111	111	111	111	111	111	111	111	110	110	110
H(20)-F(21)-B(22)	122	122	122	123	123	123	124	123	148	148	148
H(20)-C(1)-C(2)	80	81	83	85	87	89	90	88	99	102	103
F(23)-B(22)-F(21)	92	92	92	92	93	93	94	100	106	106	106
F(24)-B(22)-F(21)	93	93	93	93	94	94	95	101	110	110	110
F(25)-B(22)-F(21)	94	94	94	94	94	95	95	102	109	109	109
C(26)-C(31)-C(30)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(27)-C(26)-C(31)	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118	118
C(28)-C(27)-C(26)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
C(29)-C(28)-C(27)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(30)-C(29)-C(28)	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119	119
C(31)-C(30)-C(29)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
C(32)-C(26)-C(31)	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121	121
H(33)-C(27)-C(26)	120	120	120	120	120	120	120	120	119	119	119
H(34)-C(28)-C(27)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(35)-C(29)-C(28)	121	121	121	121	121	121	121	121	120	120	120
H(36)-C(30)-C(29)	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120	120
H(37)-C(31)-C(30)	119	119	119	119	119	119	119	119	120	120	120
H(38)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(39)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111
H(40)-C(32)-C(26)	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111	111

Таблица 3. Изменение зарядов вдоль пути взаимодействия комплексного катализатора $H_2O \cdot BF_3$ с *n*-метилстиролом в толуоле стехиометрического состава 1:1:1.

Атом	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C(1)	-0,209	-0,212	-0,214	-0,220	-0,226	-0,238	-0,245	-0,257	-0,270	-0,290
C(2)	-0,174	-0,178	-0,177	-0,177	-0,178	-0,177	-0,178	-0,173	-0,168	-0,152
H(3)	0,119	0,120	0,118	0,119	0,121	0,121	0,123	0,124	0,124	0,122
H(4)	0,134	0,136	0,143	0,144	0,146	0,156	0,157	0,159	0,161	0,167

H(5)	0,105	0,106	0,105	0,107	0,108	0,108	0,110	0,112	0,114	0,116
C(6)	-0,054	-0,053	-0,062	-0,059	-0,058	-0,061	-0,060	-0,060	-0,061	-0,065
C(7)	-0,068	-0,067	-0,056	-0,056	-0,056	-0,055	-0,054	-0,052	-0,051	-0,046
C(8)	-0,090	-0,090	-0,084	-0,084	-0,084	-0,084	-0,083	-0,083	-0,083	-0,084
C(9)	-0,120	-0,120	-0,123	-0,122	-0,122	-0,122	-0,122	-0,122	-0,121	-0,121
C(10)	-0,084	-0,084	-0,086	-0,086	-0,086	-0,086	-0,086	-0,086	-0,086	-0,086
C(11)	-0,064	-0,064	-0,060	-0,061	-0,061	-0,060	-0,060	-0,060	-0,060	-0,057
H(12)	0,104	0,105	0,100	0,101	0,102	0,103	0,104	0,104	0,104	0,100
H(13)	0,088	0,088	0,087	0,087	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,089
H(14)	0,086	0,086	0,086	0,086	0,087	0,087	0,087	0,088	0,088	0,088
H(15)	0,092	0,092	0,091	0,092	0,092	0,092	0,093	0,093	0,094	0,094
C(16)	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177	-0,177
H(17)	0,100	0,099	0,095	0,095	0,095	0,095	0,095	0,095	0,096	0,096
H(18)	0,098	0,098	0,106	0,106	0,106	0,107	0,107	0,107	0,108	0,108
H(19)	0,114	0,114	0,110	0,110	0,111	0,110	0,110	0,110	0,111	0,110
H(20)	0,346	0,348	0,349	0,351	0,354	0,356	0,360	0,366	0,372	0,378
F(21)	-0,334	-0,336	-0,338	-0,340	-0,344	-0,347	-0,351	-0,356	-0,362	-0,368
B(22)	0,816	0,818	0,815	0,817	0,818	0,820	0,821	0,823	0,825	0,822
F(23)	-0,288	-0,288	-0,288	-0,288	-0,289	-0,290	-0,291	-0,292	-0,293	-0,292
F(24)	-0,273	-0,274	-0,274	-0,275	-0,275	-0,274	-0,274	-0,275	-0,276	-0,278
F(25)	-0,263	-0,263	-0,263	-0,263	-0,264	-0,264	-0,265	-0,265	-0,266	-0,266
C(26)	-0,123	-0,124	-0,123	-0,123	-0,123	-0,118	-0,118	-0,118	-0,118	-0,116
C(27)	-0,098	-0,098	-0,098	-0,099	-0,100	-0,100	-0,100	-0,100	-0,101	-0,100
C(28)	-0,088	-0,088	-0,087	-0,087	-0,087	-0,087	-0,087	-0,087	-0,087	-0,083
C(29)	-0,130	-0,130	-0,126	-0,126	-0,125	-0,126	-0,126	-0,125	-0,124	-0,127
C(30)	-0,100	-0,100	-0,100	-0,099	-0,096	-0,097	-0,095	-0,093	-0,091	-0,093
C(31)	-0,099	-0,099	-0,104	-0,104	-0,105	-0,108	-0,108	-0,109	-0,110	-0,114
C(32)	-0,175	-0,175	-0,174	-0,174	-0,174	-0,175	-0,175	-0,174	-0,174	-0,174
H(33)	0,089	0,089	0,088	0,088	0,088	0,087	0,087	0,087	0,087	0,087
H(34)	0,099	0,098	0,098	0,097	0,097	0,096	0,096	0,096	0,096	0,095
H(35)	0,118	0,118	0,117	0,118	0,117	0,115	0,115	0,115	0,114	0,110
H(36)	0,105	0,105	0,106	0,106	0,106	0,106	0,106	0,107	0,107	0,112
H(37)	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,087	0,088
H(38)	0,100	0,100	0,100	0,100	0,099	0,098	0,098	0,097	0,097	0,097
H(39)	0,096	0,096	0,096	0,096	0,096	0,097	0,097	0,097	0,097	0,097
H(40)	0,114	0,114	0,114	0,114	0,114	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113

Продолжение Таблицы 3.

Атом	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
------	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

C(1)	-0,303	-0,315	-0,328	-0,338	-0,347	-0,350	-0,351	-0,369	-0,288	-0,268	-0,245
C(2)	-0,146	-0,138	-0,127	-0,116	-0,101	-0,090	-0,075	-0,022	0,119	0,115	0,110
H(3)	0,124	0,125	0,124	0,125	0,124	0,126	0,129	0,147	0,242	0,239	0,237
H(4)	0,168	0,170	0,174	0,174	0,176	0,176	0,177	0,186	0,181	0,172	0,165
H(5)	0,118	0,121	0,123	0,126	0,128	0,130	0,132	0,138	0,118	0,112	0,106
C(6)	-0,067	-0,070	-0,075	-0,080	-0,086	-0,091	-0,099	-0,133	-0,213	-0,211	-0,211
C(7)	-0,046	-0,044	-0,042	-0,040	-0,038	-0,035	-0,031	-0,008	0,067	0,069	0,069
C(8)	-0,083	-0,084	-0,084	-0,084	-0,084	-0,085	-0,085	-0,088	-0,113	-0,111	-0,110
C(9)	-0,120	-0,120	-0,119	-0,118	-0,117	-0,116	-0,114	-0,105	-0,054	-0,054	-0,053
C(10)	-0,086	-0,086	-0,086	-0,087	-0,087	-0,088	-0,088	-0,092	-0,114	-0,114	-0,115
C(11)	-0,057	-0,057	-0,054	-0,054	-0,050	-0,049	-0,046	-0,032	0,021	0,022	0,023
H(12)	0,101	0,101	0,100	0,101	0,100	0,101	0,103	0,112	0,181	0,178	0,178
H(13)	0,089	0,090	0,090	0,090	0,091	0,091	0,092	0,097	0,119	0,119	0,119
H(14)	0,088	0,089	0,089	0,090	0,090	0,091	0,092	0,095	0,108	0,108	0,108
H(15)	0,095	0,095	0,096	0,096	0,097	0,098	0,099	0,103	0,120	0,122	0,123
C(16)	-0,178	-0,178	-0,178	-0,178	-0,178	-0,178	-0,178	-0,180	-0,186	-0,186	-0,186
H(17)	0,096	0,096	0,096	0,096	0,097	0,097	0,098	0,101	0,118	0,118	0,118
H(18)	0,108	0,108	0,109	0,109	0,110	0,110	0,111	0,113	0,122	0,124	0,125
H(19)	0,111	0,111	0,111	0,112	0,112	0,113	0,114	0,118	0,136	0,135	0,135
H(20)	0,385	0,392	0,398	0,404	0,406	0,407	0,407	0,416	0,207	0,202	0,195
F(21)	-0,375	-0,383	-0,391	-0,400	-0,410	-0,423	-0,440	-0,441	-0,471	-0,472	-0,472
B(22)	0,825	0,828	0,829	0,832	0,834	0,839	0,847	0,860	0,866	0,866	0,866
F(23)	-0,294	-0,295	-0,297	-0,299	-0,301	-0,305	-0,311	-0,364	-0,471	-0,470	-0,470
F(24)	-0,278	-0,279	-0,280	-0,282	-0,283	-0,285	-0,290	-0,326	-0,389	-0,389	-0,389
F(25)	-0,267	-0,268	-0,269	-0,270	-0,272	-0,274	-0,278	-0,316	-0,412	-0,412	-0,411
C(26)	-0,117	-0,117	-0,116	-0,116	-0,115	-0,115	-0,116	-0,117	-0,122	-0,121	-0,121
C(27)	-0,101	-0,101	-0,101	-0,101	-0,101	-0,101	-0,102	-0,103	-0,124	-0,121	-0,121
C(28)	-0,084	-0,085	-0,084	-0,085	-0,085	-0,086	-0,087	-0,090	-0,113	-0,111	-0,112
C(29)	-0,125	-0,126	-0,128	-0,128	-0,128	-0,129	-0,130	-0,132	-0,123	-0,124	-0,124
C(30)	-0,089	-0,088	-0,089	-0,088	-0,088	-0,087	-0,086	-0,094	-0,093	-0,093	-0,093
C(31)	-0,114	-0,114	-0,115	-0,115	-0,115	-0,115	-0,115	-0,114	-0,109	-0,110	-0,109
C(32)	-0,174	-0,174	-0,175	-0,174	-0,175	-0,175	-0,175	-0,174	-0,171	-0,172	-0,172
H(33)	0,086	0,086	0,086	0,086	0,086	0,086	0,085	0,085	0,084	0,084	0,084
H(34)	0,095	0,095	0,095	0,095	0,095	0,094	0,094	0,094	0,125	0,125	0,125
H(35)	0,109	0,108	0,107	0,107	0,107	0,107	0,108	0,115	0,150	0,148	0,148
H(36)	0,112	0,112	0,114	0,115	0,115	0,116	0,118	0,125	0,100	0,099	0,099
H(37)	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,088	0,084	0,083	0,083
H(38)	0,097	0,097	0,096	0,096	0,096	0,096	0,096	0,095	0,092	0,092	0,092
H(39)	0,097	0,097	0,098	0,098	0,098	0,098	0,098	0,097	0,092	0,092	0,092

H(40)	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113	0,113	0,114	0,114	0,114
-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Список литературы

1. Цирельсон, В.Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. – Изд-во Бином, **2010**, 422 с.
2. Granovsky, A. A., Firefly version 8, **2013**. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System, M.W. Schmidt [and others], J.Comput.Chem. **1993**, 14, 1347-1363.
4. Potential Energy Surface of Interaction between Ethriolbicyclophosphite and Acetyl Chloride (Second Stage). V. A. Babkin [and others], Oxidation Communications, **2018**, 41(2), 231-239.
5. On the Mechanism of Cationic Polymerisation of P-Isopropylstyrene in the Presence of a Complex Catalyst Boron Fluoride-Water, V. A. Babkin [and others], Oxidation Communications, **2019**, 42(1), 56-62.
6. Квантово-химическое изучение механизма протонирования 2,3,4,5-тераметилстирола методом АВ INITIO. В.А. Бабкин [и др.], Известия Волгоградского государственного технического университета, **2019**, 5(228), 22-28.
7. О механизме инициирования катионной полимеризации *n*-этилстирола в присутствии комплексного катализатора фторид бора – вода. Бабкин В.А. [и др.], Fluorine Notes, **2019**, 3(124), 3-4.
8. Quantum chemical investigation of the initiation mechanism of the cationic polymerisation of 4-methylpentene-1 with chloride–aluminum aquacomplex. V. A. Babkin [and others], Oxidation Communications, **2019**, 42 (3), 275–281.
9. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS., B.M. Bode, M.S. Gordon, Journal of Molecular Graphics, **1998**, 16, 133-138.

References

1. Cirelson V.G., Quantum Chemistry. Molecules, molecular systems and solids, Moscow, Publishing House «Binom», **2010**, 496 p. (in Russian).
2. Granovsky, A. A., Firefly version 8, **2013**. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
3. General Atomic and Molecular Electronic Structure System, M.W. Schmidt [and others], J.Comput.Chem. **1993**, 14, 1347-1363.

4. Potential Energy Surface of Interaction between Ethriolbicyclophosphite and Acetyl Chloride (Second Stage). V. A. Babkin [and others], *Oxidation Communications*, **2018**, 41(2), 231-239.
5. On the Mechanism of Cationic Polymerisation of P-Isopropylstyrene in the Presence of a Complex Catalyst Boron Fluoride-Water, V. A. Babkin [and others], *Oxidation Communications*, **2019**, 42(1), 56-62.
6. Quantum-chemical study of the mechanism of protonation of 2,3,4,5-teramethylstyrene by the AB INITIO method. V. A. Babkin [and others], *Bulletin of the Volgograd State Technical University*, **2019**, 5(228), 22-28. (in Russian).
7. About the mechanism of cationic polymerization of p-ethylstyrene in the presence of a complex catalyst boron fluoride – water. V. A. Babkin [and others], *Fluorine Notes*, **2019**, 3(124), 3-4.
8. Quantum chemical investigation of the initiation mechanism of the cationic polymerisation of 4-methylpentene-1 with chloride–aluminum aquacomplex. V. A. Babkin [and others], *Oxidation Communications*, **2019**, 42 (3), 275–281.
9. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS., B.M. Bode, M.S. Gordon, *Journal of Molecular Graphics*, **1998**, 16, 133-138.