III-P-1.1

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT TÍNH THÂN ĐIỆN TỬ CỦA MỘT SỐ CHẤT DẪN XUẤT TỪ ACETYLPYRIDINE VÀ ACETOPHENONE

Bùi Thọ Thanh, Phùng Quán, Trần Võ Trinh
Khoa Hóa học, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp.HCM

Tóm tắt

Công trình nầy trình bày một số kết quả nghiên cứu mới thực hiện về tính thân điện tử của một số chất dẫn xuất từ acetylpyridine và acetophenone.

Cấu trúc và một số tính chất của các tác nhân thân điện tử (năng lượng của orbital phân tử trống thấp nhất, điện tích dương trên nguyên tử carbon của nhóm carbonyl, ...) đã được xác định bằng phương pháp tính toán hoá lượng tử thích hợp (phương pháp AM1, phần mềm HyperChem 8.08).

Các kết quả tính toán nhận được cho thấy rằng:

(1) Tính thân điện tử của các chất dẫn xuất từ acetylpyridine và acetophenone có thể được ước lượng bằng một số đại lượng tính được từ các tính toán lượng tử đơn giản.

(2) Tác nhân thân điện tử dạng dication chỉ có hoạt tính cao khi các tâm mang điện tích ở vị trí tiếp cách hay ở gần nhau.

Các tác nhân thân điện tử dạng dication có hoạt tính rất mạnh, được gọi là các tác nhân siêu thân điện tử, có rất nhiều ứng dụng hữu ích trong hoá học.

Từ khoá: Tác nhân siêu thân điện tử. Tính toán lượng tử. Acetophenone. Acetylpyridine.

THEORETICAL STUDY OF ELECTROPHILICITY FOR ACETOPHENONE AND ACETYLPYRIDINE-DERIVED COMPOUNDS

Bui Tho Thanh, Phung Quan, Tran Vo Trinh
Faculty of Chemistry, University of Science - VNU HCMC

Abstract

The aim of this contribution is to present some new results on electrophilicity of acetophenone and acetylpyridine derivatives.

Structures and some properties of electrophiles (energy of lowest unoccupied molecular orbital, positive charge on carbon atom of carbonyl group, ...) are determined by appropriate quantum caculations (AM1 method, HyperChem 8.08 software).

The obtained results show that:

(1) Electrophilicity of acetophenone and acetylpyridine derivatives could have been estimated via some quantities calculated by simple quantum calculations.

(2) Dicationic electrophiles only show high reactivity when the positive charge centers are conjugated or in close proximity.

The highly reactive dicationic electrophiles, named superelectrophiles, have many useful applications in chemistry.

Key words: Superelectrophiles. Quantum calculations. Acetophenone. Acetylpyridine.