

### III-O-3.1

## KHẢO SÁT LÝ THUYẾT PHẢN ỨNG PICTET–SPENGLER ĐƯỢC XÚC TÁC BẰNG SUPERACID CỦA CÁC N-BENZYLIDENE-2-PHENETHYLAMINE

Bùi Thọ Thanh, Đặng Thị Ngân Hà

Khoa Hóa học, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

### Tóm tắt

Mục tiêu của bài báo cáo này là nhằm trình bày các kết quả của việc khảo sát phản ứng Pictet-Spengler của các dẫn xuất của N-benzylidene-2-phenethylamine, khi được xúc tác bởi superacid trifluoromethanesulfonic, TFSA, hay bởi acid trifluoroethanoic (TFA), bằng cách sử dụng các phương pháp tính toán cơ học lượng tử ab-initio. Cấu trúc và các đại lượng có liên quan của các phân tử, monocations, dications và trạng thái chuyển tiếp trong các phản ứng đã được khảo sát bằng cách tính RHF/6-31G\* với bộ chương trình Gaussian 03W phiên bản B.04 và chương trình GaussView phiên bản 4.1.2. Việc tính toán tần số đã được thực hiện để bảo đảm là các cấu trúc nhận được tương ứng với các cực tiểu năng lượng và không có một tần số ảo nào. Các trạng thái chuyển tiếp của các phản ứng đã được xác định và kiểm tra bởi cách tính tọa độ nội. Kết quả nhận được cho thấy rằng hoạt tính thân điện tử của các dication superelectrophile N,N-diprotonated N-benzylidene-2-phenethylamine, được tạo ra trong các phản ứng được xúc tác bởi superacid TFSA, mạnh hơn gấp nhiều lần hoạt tính thân điện tử của monocation N-monoprotonated N-benzylidene-2-phenethylamine, được tạo ra trong các phản ứng được xúc tác bởi TFA. Các kết quả này đã củng cố thêm vai trò của các superelectrophile trong các phản ứng hóa học và làm rõ hoạt tính electrophile siêu mạnh của chúng

## QUANTUM CHEMISTRY STUDY ON PICTET – SPENGLER REACTIONS CATALYZED BY SUPERACIDS OF N-BENZYLIDENE-2-PHENETHYLAMINES

### Abstract

The objective of this contribution is to introduce the recent theoretical results of the study of the Pictet-Spengler reaction of N-benzylidene-2-phenethylamine derivatives, when catalyzed by trifluoromethanesulfonic superacid, TFSA, or by trifluoroethanoic acid (TFA), using the ab-initio quantum mechanical calculations. The structure and the related quantities of the molecules, monocations, dications and transition states in the reactions were investigated by the RHF/6-31G \* calculations by using the Gaussian 03W (version B.04) and GaussView (version 4.1.2) programs. The frequency calculations have been made to ensure that the receiving structures corresponding to the energy minima and do not have a virtual frequency. The transition states of reactions have been identified and tested by the calculation of internal reaction coordinates. The obtained results show that the electrophilicity of the dication superelectrophiles of N, N-diprotonated N-benzylidene-2-phenethylamines, generated in the reaction catalyzed by TFSA superacid, many times stronger than those of the corresponding monocations of N-monoprotonated N-benzylidene-2-phenethylamines, generated in the reaction catalyzed by TFA. These results reinforce the role of superelectrophiles in the chemical reactions and clarify their super strong electrophilicity.

---

Email liên hệ: [btthanh@hcmus.edu.vn](mailto:btthanh@hcmus.edu.vn)