

NGHIÊN CỨU PHẢN ỨNG CHỨC NĂNG HÓA FULLERENE (C₆₀) VỚI CÁC DẪN XUẤT FLAVONOID MALONATE BẰNG PHƯƠNG PHÁP HÓA TÍNH TOÁN

INVESTIGATING FUNCTIONALIZATION ON FULLERENE (C₆₀) WITH FLAVONOID MALONATE DERIVATIVES VIA THE COMPUTATIONAL CHEMISTRY METHOD

Tác giả: Nguyễn Minh Thông, Phạm Cẩm Nam

Phân hiệu Đại học Đà Nẵng tại Kon Tum; nmthong@kontum.udn.vn

Trường Đại học Bách khoa, Đại học Đà Nẵng

Tóm tắt:

Trong bài báo này, chúng tôi đã sử dụng phương pháp bán thực nghiệm PM6 để nghiên cứu cơ chế của phản ứng Bingel – Hirsch giữa anion dimethyl bromomalonate và fullerene (C₆₀). Bởi vì fullerene có hai loại liên kết (5,6) và (6,6) tham gia phản ứng, nên sẽ có hai đồng phân sản phẩm tương ứng được hình thành. Kết quả nghiên cứu cho thấy, phản ứng đóng vòng xảy ra ở liên kết (6,6) là ưu tiên hơn so với liên kết (5,6) và phản ứng con đường đi qua trạng thái chuyển tiếp **TS**_{[6,6]-1} là thuận lợi về mặt nhiệt động. Ngoài ra, giản đồ năng lượng của phản ứng chức năng hóa fullerene bằng các dẫn xuất malonate có nguồn gốc từ chalcone, flavone và flavanone cũng được thiết lập. Kết quả nghiên cứu lý thuyết về quá trình hình thành sản phẩm fullerene-flavonoid ở vị trí liên kết (6,6) theo cơ chế Bingel – Hirsch là phù hợp với kết quả thực nghiệm.

Từ khóa : Fullerene; Flavonoid; Bingel – Hirsch; Malonate; PM6.

Abstract:

In this paper, we have used the semi-empirical method (PM6) to study the mechanism of the Bingel - Hirsch reaction between dimethyl bromomalonate anion and fullerene (C₆₀). Because fullerene has simultaneously two symmetrically unique bonds namely (5,6) and (6,6), two isomers as corresponding products will be formed. The study results show that the cycloaddition reaction at the (6,6) bond is more favourable than the one at the (5,6) bond and the reaction path which goes through the transition state **TS**_{[6,6]-1} is thermodynamically favourable. In addition, the energy profile of fullerene functionalization from malonate derivatives containing chalcone, flavone and flavanone have also been established. The theoretical findings of the formation of fullerene-flavonoid products at the (6,6) bond via the Bingel - Hirsch mechanism prove to be in line with experimental results.

Key words: Fullerene; Flavonoid; Bingel – Hirsch; Malonate; PM6.