

# Khảo sát cấu trúc dẫn xuất Clo của phân tử Bisphenol A bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ

Vũ Văn Đạt<sup>1,\*</sup>, Lê Kim Long<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Đại học Quốc gia Hà Nội, 144 Xuân Thủy, Hà Nội, Việt Nam*

<sup>2</sup>*Trung tâm Ứng dụng Tin học trong Hóa học, Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội*

Nhận ngày 5 tháng 1 năm 2015

Chỉnh sửa ngày 6 tháng 3 năm 2015; Chấp nhận đăng ngày 8 tháng 9 năm 2015

**Tóm tắt:** Bài báo trình bày kết quả nghiên cứu một số dẫn xuất chứa clo của Bisphenol A trong pha khí. Trong nghiên cứu này chúng tôi sử dụng Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) với các hàm M06 Hybridmeta - GGA sử dụng bộ hàm cơ sở DGAUSSDZVP và TZVP kèm theo là bộ hàm DGA1 và TZVPfit mật độ tương thích. Các tính toán tập trung tìm cách tối ưu hóa về cấu trúc các phân tử, các tần số dao động và các giá trị năng lượng obitan với độ chính xác phù hợp. Kết quả thu được đã chỉ ra rằng phương pháp M06 đã mô tả chính xác cấu hình phân tử của cả 4 dẫn xuất clo của bisphenol A. Phân bố mật độ điện tích tính được cho thấy rõ ràng sự thay đổi về mật độ điện tích của phân tử khi đưa nhóm thế Cl vào phân tử so với chưa thay thế. Các kết quả thu được có thể sử dụng để bàn luận về cơ chế các phản ứng thay thế clo vào phân tử bisphenol A và giải thích các kết quả thu được từ các nghiên cứu thực nghiệm.

*Từ khóa:* Bisphenol A, Lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), hàm M06 Hybridmeta – GGA.

## 1. Đặt vấn đề

Bisphenol A (BPA) là hợp chất dễ tổng hợp đã và đang được sử dụng trong sản xuất polycarbonate và nhựa epoxy. BPA còn được sử dụng như chất làm ổn định hay chống oxi hóa cho nhiều loại chất dẻo (plastics) như PVC, v.v... Các sản phẩm nhựa làm từ BPA thường trong suốt, cứng và được sử dụng nhiều trong sản xuất các hàng hóa tiêu dùng thông thường như bình sữa cho trẻ em, thiết bị thể thao, đĩa CD và DVD, v.v...[1,2]. Khi sản xuất các vật

liệu này khó mà tránh được sự tồn dư BPA ở dạng tự do trong sản phẩm. Nhiều nghiên cứu hóa sinh trong thời gian gần đây đã đề cập đến khả năng BPA là nguyên nhân gây ra những rối loạn nội tiết trong cơ thể, góp phần gia tăng rủi ro đối với các bệnh liên quan đến tim mạch, béo phì [3] tiểu đường [4,5], ảnh hưởng khả năng phát triển trí não của trẻ em [6]; thậm chí làm giảm độ nhạy cảm đối với các bệnh nhân đang sử dụng biện pháp hóa trị liệu, ảnh hưởng hoạt động tuyến tiền liệt, gây ra ung thư vú, u nang buồng trứng ...[7]. Chính vì có nhiều tác dụng phụ của các sản phẩm sử dụng BPA mà nhiều nghiên cứu gần đây đã tìm ra chất thay thế BPA

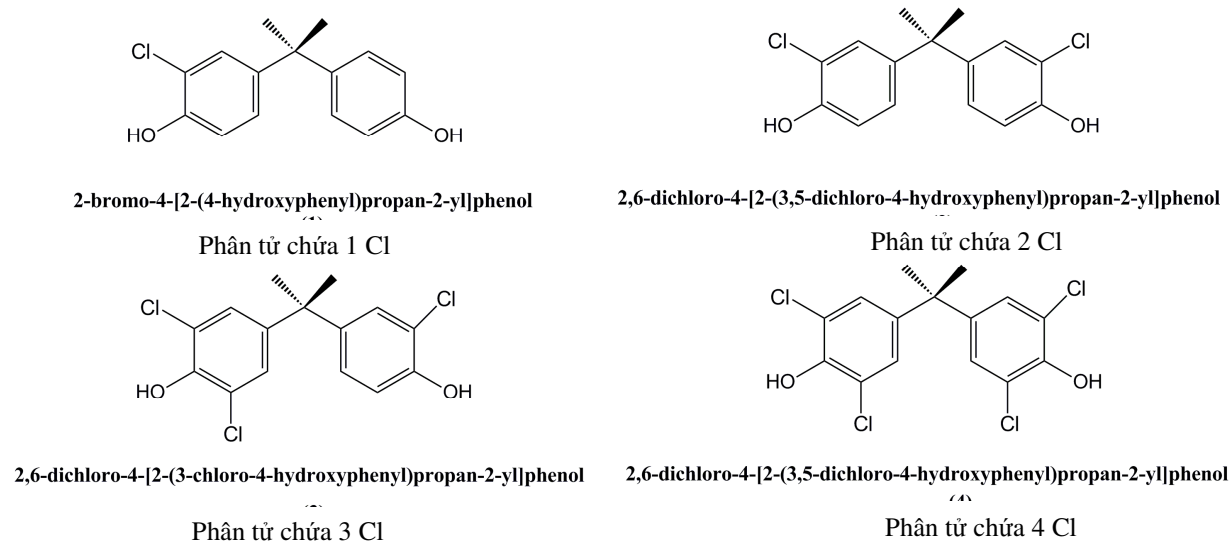
\* Tác giả liên hệ. ĐT: 84-934277732.  
Email: datvv@vnu.edu.vn

hoặc các hãng sản xuất đồ đựng phải công bố trong sản phẩm không có BPA tự do (BPA free).

Một trong những nguồn tiếp xúc của con người với BPA đó là qua đường ăn uống đựng trong vật dụng chứa BPA. BPA tồn tại trong các sản phẩm polycarbonate và nhựa epoxy nên nó hoàn toàn có thể thôi nhiễm ra thực phẩm khi thực phẩm được chứa đựng trong các vật dụng có nguồn gốc từ BPA. Khi tan trong nước, BPA dễ dàng phản ứng với clo tự do trong nước (tồn tại ở dạng hypochlorua) tạo thành các dẫn xuất clo của BPA [8,9].

Trong khuôn khổ bài báo, chúng tôi trình bày các kết quả thu được khi nghiên cứu, khảo

sát cấu trúc một số dẫn xuất là các sản phẩm của quá trình clo hóa với BPA (Hình 1) bằng các tính toán lý thuyết hóa lượng tử. Chúng tôi tiến hành khảo sát cấu trúc phân tử của 4 dẫn xuất clo của BPA thông qua xác định cấu hình ứng với trạng thái cực tiểu năng lượng toàn cục nhằm thu được các thông số cấu trúc, năng lượng obitan phân tử và mật độ điện tích, năng lượng obitan phân tử HOMO- LUMO, momen lưỡng cực, năng lượng toàn phần. Mục đích của nghiên cứu này là tiền đề để chúng tôi tiếp tục thực hiện các nghiên cứu sâu hơn để xây dựng mối liên hệ định lượng giữa cấu trúc phân tử mô phỏng và hoạt tính sinh học của BPA và các dẫn xuất của nó.



Hình 1. Các dẫn xuất chứa clo của BPA.

## 2. Phương pháp nghiên cứu

Các tính toán được thực hiện dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (Density Functional Theory- DFT) được cụ thể hóa bằng phần mềm Gaussian 09 [10]. Việc tối ưu hóa cấu hình xác định cực tiểu toàn cục được thực hiện bởi phiếm hàm lai hóa Meta GGA – phiếm hàm

M06 [11] với khả năng xác định tốt cực tiểu toàn cục và xác lập tốt các tính chất nhiệt động học.

Nhằm làm giảm thời gian tính toán và tăng khả năng hội tụ đạt đến cấu hình cực tiểu toàn cục và tính chính xác trong tính toán tối ưu cấu trúc và năng lượng toàn phần, các phân tử được xét đều được tối ưu cấu hình bằng các bộ hàm

cơ sở DGAUSS đã được hiệu chỉnh là DZVP (Double-Zeta Valance Polarization) [12], và TZVP (Triple-Zeta Valance Polarization) [13] cho các tính toán năng lượng toàn phần. Các bộ hàm cơ sở DZVP và TZVP được hiệu chỉnh bằng cách đưa thêm vào bộ hàm gốc các tệp mật độ cơ sở mô phỏng DGA1 [11] (với hàm cơ sở DZVP) và TZVPfit [14] (với bộ hàm cơ sở TZVP) đã được tích hợp trong phiên bản Gaussian 09.

Tất cả các cấu hình phân tử tối ưu ứng với trạng thái cực tiểu toàn cục được xác định bằng

việc phân tích các tần số dao động điều hòa và các tiêu chuẩn hội tụ tích hợp sẵn trong phần mềm Gaussian 09.

### 3. Kết quả và thảo luận

Cấu hình tối ưu của BPA và 4 dẫn xuất của quá trình clo hóa với BPA được cho trong Bảng 1. Các thông số tối ưu được so sánh với giá trị của phân tử BPA cũng được tính toán cùng phương pháp.

Bảng 1. Một số thông số được lựa chọn từ cấu hình đã tối ưu của BPA và 4 dẫn xuất của quá trình clo hóa với BPA

Độ dài liên kết/Góc liên kết	Phân tử BPA	Phân tử chứa 1 clo	Phân tử chứa 2 clo	Phân tử chứa 3 clo	Phân tử chứa 4 clo	Đánh giá
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}}$ (Å)	1.394	1.394	1.394	1.394	1.394	Không thay đổi
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{metyl}} - C_{\text{phenyl}}$ (Å)	1.510	1.527	1.527	1.527	1.527	Thay đổi do có Clo
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{metyl}} - C_{\text{metyl}}$ (Å)	1.528	1.534	1.533	1.533	1.533	Không thay đổi
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{phenyl}} - O$ (Å)	1.376	1.358	1.353	1.350	1.346	Giảm theo số nguyên tử clo
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{metyl}} - H$ (Å)	1.116	1.095	1.095	1.096	1.095	Thay đổi khi có clo, không phụ thuộc số lượng clo trong phân tử
Giá trị trung bình của liên kết $C_{\text{phenyl}} - H$ (Å)	1.098	1.088	1.087	1.088	1.087	Thay đổi không đáng kể
$C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - O$ (độ)	116.6	118.1	118.5	118.8	123.9	Góc liên kết tăng khi tăng số lượng nguyên tử clo
$C_{\text{phenyl}} - O - H$ (độ)	107.8	108.9	108.9	108.8	108.7	Thay đổi khi có nguyên tử clo, không phụ thuộc số nguyên tử clo
$C_{\text{phenyl}} - Cl_{(1)}$ (Å)		1.756	1.755	1.737	1.737	
$C_{\text{phenyl}} - Cl_{(2)}$ (Å)		—	1.756	1.738	1.737	Không thay đổi theo số nguyên tử clo
$C_{\text{phenyl}} - Cl_{(3)}$ (Å)		—	—	1.754	1.752	
$C_{\text{phenyl}} - Cl_{(4)}$ (Å)		—	—	—	1.752	
$C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - Cl_{(1)}$ (độ)		118.5	119.9	118.5	119.9	
$C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - Cl_{(2)}$ (độ)		—	119.7	118.5	119.8	Không thay đổi theo số nguyên tử clo
$C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - Cl_{(3)}$ (độ)		—	—	119.2	119.9	
$C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - Cl_{(4)}$ (độ)		—	—	—	119.8	

Bảng 1 cho thấy độ dài liên kết  $C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}}$  trong vòng benzen của các phân tử BPA, và 4 dẫn xuất không thay đổi khi thế các nguyên tử clo vào vòng benzen của phân tử BPA; độ dài liên kết  $C_{\text{metyl}} - C_{\text{metyl}}$  của các phân tử khảo sát thay đổi không đáng kể (0.005 Å) và không phụ thuộc vào số lượng nguyên tử clo có trong phân tử; có sự thay đổi tăng (0.017 Å) về độ dài liên kết  $C_{\text{metyl}} - C_{\text{phenyl}}$  khi thế nguyên tử clo vào vòng benzen của phân tử BPA nhưng không phụ thuộc vào số lượng nguyên tử clo; liên kết  $C_{\text{metyl}} - H$  và liên kết  $C_{\text{phenyl}} - H$  giảm (0.02 Å và 0.01 Å) nhưng không phụ thuộc vào số lượng nguyên tử clo được thế trong phân tử BPA. Nói cách khác cấu trúc mạch chính của BPA rất gần với cấu trúc mạch chính của 4 dẫn xuất clo của nó; liên kết  $C_{\text{phenyl}} - O$  thay đổi

giảm (0.018 Å và 0.03 Å) theo chiều hướng tăng nguyên tử clo trong phân tử khảo sát là do mật độ phân bố electron tăng xuất hiện sự đẩy giữa lớp vỏ electron của nguyên tử clo ( $3s^23p^5$ ) với lớp vỏ electron của nguyên tử oxy ( $2s^22p^4$ ) làm cho liên kết C - O trong các phân tử khảo sát bị "ngắn" lại; góc liên kết  $C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - O$  thay đổi tăng ( $1.50^0 - 5.30^0$ ) khi phân tử BPA thế các nguyên tử clo vào vòng benzen; góc liên kết  $C_{\text{phenyl}} - O - H$  trong các phân tử khảo sát thay đổi không đáng kể; các góc liên kết  $C_{\text{phenyl}} - C_{\text{phenyl}} - Cl$  của 4 dẫn xuất gần như không thay đổi. Như vậy việc thế nguyên tử H bằng các nguyên tử Cl vào vòng phenyl không ảnh hưởng đến cấu trúc không gian của BPA nói chung.

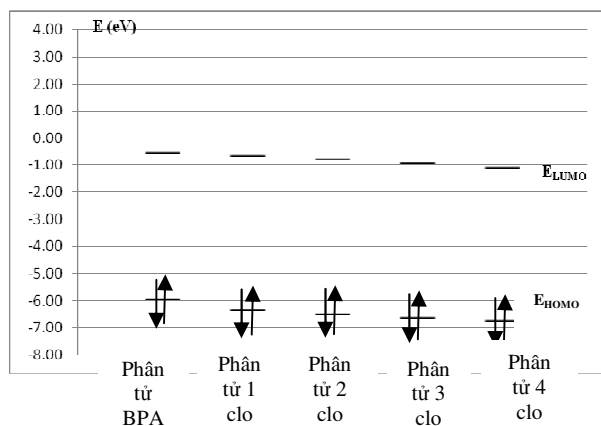
Bảng 2. Các thông số lượng tử thu được bằng phương pháp M06/TZVP

Phân tử	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$\Delta E$ (eV)	$\mu$ (Debye)	$\Delta E_{\text{phân tử}} = E_{\text{phân tử}} - E_{\text{min}}$ (e.V)
Phân tử BPA	-5.92	-0.51	5.40	2.4158	50016.0
Phân tử chứa 1 Cl	-6.33	-0.62	5.71	1.0992	37519.0
Phân tử chứa 2 Cl	-6.49	-0.76	5.73	1.2309	25012.6
Phân tử chứa 3 Cl	-6.61	-0.90	5.71	3.8476	12506.4
Phân tử chứa 4 Cl	-6.73	-1.08	5.65	0.5325	0

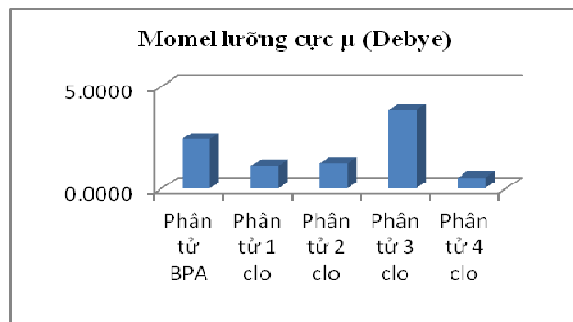
Giá trị HOMO, LUMO và  $\Delta E_{\text{MO}}$  được trình bày trong

Bảng 2. Giá trị  $\Delta E$  được tính theo biểu thức:  $\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$  nhằm đánh giá sự chênh lệch giữa hai mức năng lượng obitan phân tử HOMO và LUMO. Giá trị năng lượng HOMO và LUMO của các phân tử khác nhau khá rõ song độ chênh lệch giữa các mức năng lượng này ở cả 4 dẫn xuất không khác nhau đáng kể (Hình 2). Điều này chứng tỏ khả năng phản ứng của các dẫn xuất sẽ không khác nhau. Hình 3 cho thấy giá trị mô men lưỡng cực khác biệt khá rõ với giá trị cao nhất đạt được ở phân tử

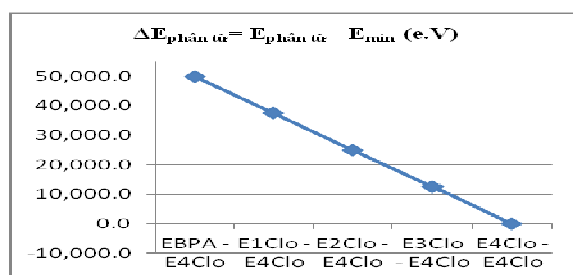
chứa 3 clo cho thấy cấu trúc bất đối xứng phân tử. Ở Bảng 2 chúng tôi thu được giá trị năng lượng phân tử tương đối  $\Delta E_{\text{phân tử}} = E_{\text{phân tử}} - E_{\text{min}}$  của các phân tử được khảo sát. Theo giá trị tính toán thu được bằng phương pháp M06/TZVP thì năng lượng phân tử của dẫn xuất 4 clo là nhỏ nhất ( $E_{\text{min}}$ ). Nhận thấy rằng năng lượng phân tử càng giảm khi số lượng nguyên tử clo có trong phân tử khảo sát càng lớn ( $\Delta E$  giảm). Như vậy chúng tôi độ bền của các phân tử được khảo sát cũng tăng khi số lượng nguyên tử clo trong phân tử tăng lên và dẫn xuất phân tử chứa 4 clo là bền nhất so với BPA và 3 dẫn xuất còn lại.



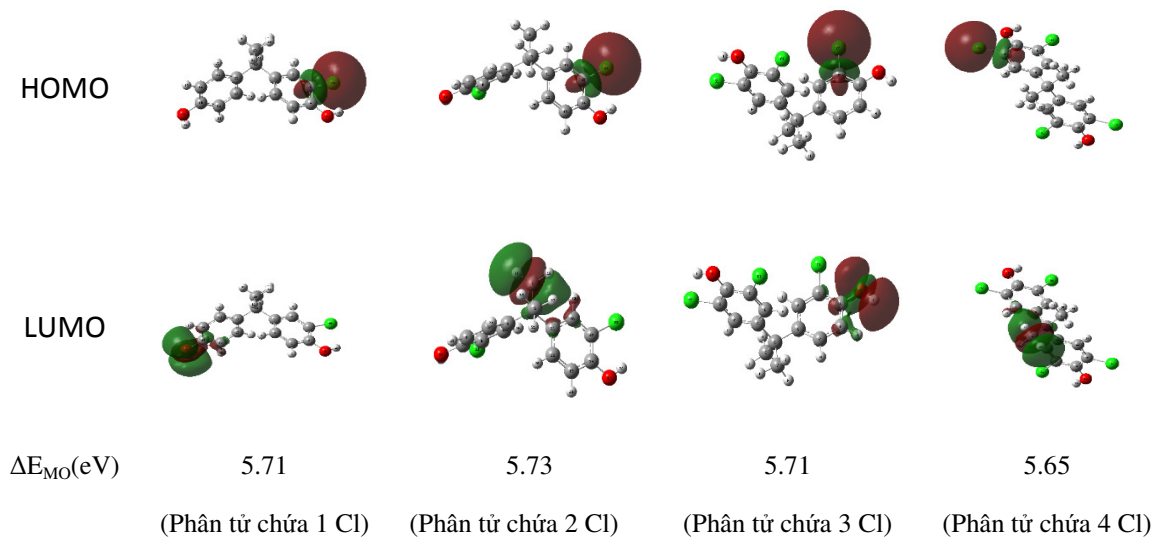
Hình 2. Biểu đồ năng lượng của LUMO và HOMO orbitan của các phân tử khảo sát.



Hình 3. Giá trị Momen lưỡng cực của các phân tử khảo sát.

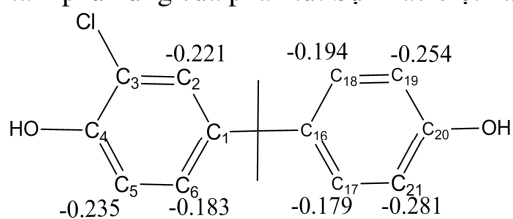


Hình 4. Năng lượng phân tử tương đối của các phân tử khảo sát.

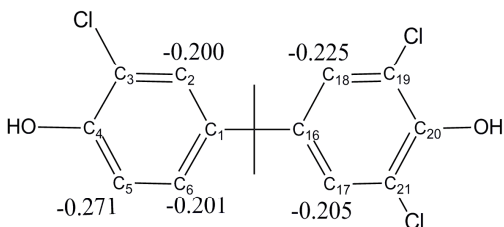


Hình 5. Hình dạng và vị trí định xứ của HOMO và LUMO trong các dẫn xuất clo của BPA.

Hình 5 trình bày về hình dạng và vị trí định xứ của các obitan phân tử HOMO và LUMO trong cả bốn dẫn xuất. Các obitan phân tử HOMO có khuynh hướng định chỗ xung quanh các nguyên tử clo, nơi có điện tích riêng phần lớn. Trong khi đó, các obitan phân tử LUMO lại có khuynh hướng phân bố hướng về xung quanh các nhóm nguyên tử như -OH, hay -CH<sub>3</sub>, là những khu vực có điện tích riêng phần nhỏ nhất. Sự phân bố như vậy sẽ ảnh hưởng đến khả năng phản ứng của các đồng phân khi các tác nhân tấn công có định hướng khác nhau đến các tâm phản ứng của phân tử. Sự khác biệt này

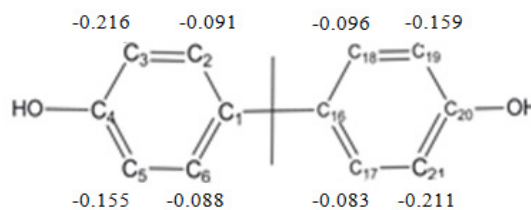


3-chloro-4-[2-(4-hydroxyphenyl)propan-2-yl]phenol  
Phân tử chứa 1 Cl

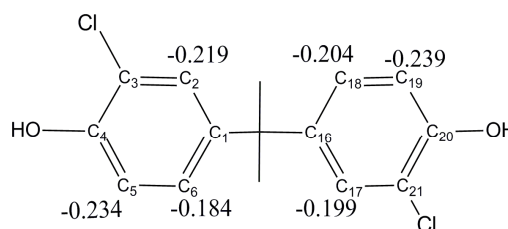


2,6-dichloro-4-[2-(3-chloro-4-hydroxyphenyl)propan-2-yl]phenol  
Phân tử chứa 3 Cl

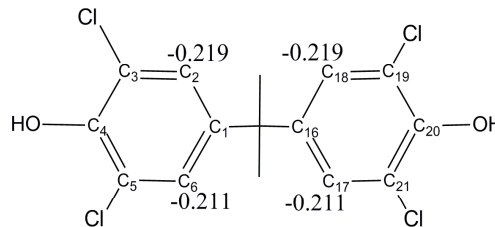
có nguyên nhân từ sự thay đổi về mật độ điện tích của phân tử của nhóm thế Cl khi được đưa vào phân tử BPA.



4,4'-(propane-2,2-diyl)diphenol  
Phân tử BPA



2,6-dichloro-4-[2-(3,5-dichloro-4-hydroxyphenyl)propan-2-yl]p  
Phân tử chứa 2 Cl



2,6-dichloro-4-[2-(3,5-dichloro-4-hydroxyphenyl)propan-2-yl]p  
Phân tử chứa 4 Cl

Hình 6. Mật độ điện tích trên các nguyên tử C trong vòng phenyl của các dẫn xuất clo của BPA.

Trong phản ứng giữa các hợp chất chứa nhóm OH với tác nhân hipoclorơ (HOCl), HOCl phản ứng theo cơ chế electrophin vào vòng thơm, kết quả là dẫn xuất clo được tạo thành. Theo cơ chế này, nếu có nguyên tử C mang điện tích âm hơn trong phân tử BPA thì phản ứng sẽ xảy ra dễ dàng và hiệu suất lớn hơn. Dựa trên cơ chế này và từ các giá trị

$\Delta E_{MO}$ , và mật độ điện tích trên các nguyên tử carbon trên phân tử BPA, chúng tôi nhận thấy phản ứng clo hóa trên phân tử BPA sẽ diễn ra trước nhất tại nguyên tử C<sub>3</sub> mang điện tích riêng phần nhỏ nhất là -0.216. Điều này dẫn tới việc hình thành phân tử mono clo bisphenol A (Phân tử chứa 1 nguyên tử clo). Phân tử chứa 1 nguyên tử clo này tiếp tục phản ứng với tác

nhân hipoclorơ, phản ứng thế electrophin nguyên tử H bằng nguyên tử clo tại nguyên tử C<sub>21</sub> mang điện tích riêng phần nhỏ nhất là -0.281 tạo thành phân tử diclo bisphenol A (Phân tử chứa 2 nguyên tử clo). Phân tử chứa 2 nguyên tử clo này tiếp tục phản ứng với tác nhân hipoclorơ, phản ứng thế electrophin nguyên tử H bằng nguyên tử clo tại nguyên tử C<sub>19</sub> hoặc C<sub>5</sub> hình thành phân tử triclo bisphenol A (Phân tử chứa 3 nguyên tử clo). Thực nghiệm [9] cũng cho thấy khả năng hình thành cả phân tử triclo bisphenol A tại cả hai vị trí trên. Trong cấu hình phân tử chúng tôi thu được, điện tích riêng phần tại vị trí nguyên tử C<sub>19</sub> nhỏ hơn điện tích riêng phần tại nguyên tử C<sub>5</sub> bởi thế, chúng tôi dự đoán cấu hình của sản phẩm chính của phản ứng clo hóa phân tử diclo bisphenol A sẽ là sản phẩm của phản ứng thế tại vị trí C<sub>19</sub> và dẫn xuất clo cuối cùng của quá trình clo hóa bisphenol A là phân tử tetraclor bisphenol A (Phân tử chứa 4 nguyên tử clo). Mật độ điện tích riêng phần của các nguyên tử C trong phân tử này được minh họa trong Hình 6.

#### 4. Kết luận

Trong khuôn khổ bài báo, chúng tôi tập trung nghiên cứu cấu trúc phân tử và phân tích các thông số lượng tử của BPA và bốn dẫn xuất clo của bisphenol A thu được sau khi tối ưu cấu hình. Phương pháp tính toán được sử dụng là M06 với hai bộ hàm cơ sở DGAUSS đã được hiệu chỉnh là DZVP và TZVP với sự có mặt của các tệp mật độ mô phỏng DGA1 và TZVPfit.

Các thông số lượng tử của cấu hình tối ưu của BPA và bốn dẫn xuất clo của bisphenol A bao gồm: các thông số cấu trúc phân tử, năng lượng orbital phân tử HOMO- LUMO, mô men lưỡng cực, năng lượng toàn phần cũng được xét đến. Các thông số cấu trúc phân tử của bốn phân tử đều phù hợp với số liệu thực nghiệm.

Việc phân tích các thông số lượng tử này tạo điều kiện để thực hiện nghiên cứu sâu hơn về tính chất hóa học, sinh học của các dẫn xuất BPA.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] M.K. Morgan, P.A. Jones, A.M. Calafat, X. Ye, C.W. Croghan, J.C. Chuang, N.K. Wilson, M.S. Clifton, Z. Figueroa, L.S. Sheldon, Environ. Sci. Technol 2011, 45, 5309.
- [2] A. Schecter, N. Malik, D. Haffner, S. Smith, T.R. Harris, O. Paepke, L. Birnbaum, Environ. Sci. Technol 2010, 44, 9425.
- [3] Rezg R, El-Fazaa S, Gharbi N, Mornagui B (March 2014). "Bisphenol A and human chronic diseases: Current evidences, possible mechanisms, and future perspectives". Environment International 2014, 64, 83–90.
- [4] Melzer D, Rice NE, Lewis C, Henley WE, Galloway TS (2010). Zhang, Baohong, ed."Association of Urinary Bisphenol a Concentration with Heart Disease: Evidence from NHANES 2003/06". PLoS ONE 5 (1).
- [5] Manikkam, M.; Tracey, R.; Guerrero-Bosagna, C.; Skinner, M. K. (January 24, 2013). "Plastics derived endocrine disruptors (BPA, DEHP and DBP) induce epigenetic transgenerational inheritance of obesity, reproductive disease and sperm epimutations". PLoS ONE 8 (1). 1–16.
- [6] D.R. Doerge, N.C. Twaddle, M. Vanlandingham, R.P. Brown, J.W. Fisher, Toxicol. Appl. Pharmacol. 2011, 255, 261.
- [7] Ho SM, Tang WY, Belmonte de Frausto J, Prins GS (2006). "Developmental exposure to estradiol and bisphenol A increases susceptibility to prostate carcinogenesis and epigenetically regulates phosphodiesterase type 4 variant 4". Cancer Res. 66 (11): 5624–32.
- [8] Fukazawa H, Hoshino K, Shiozawa T, Matsushita H, Terao Y (2001). "Identification and quantification of chlorinated bisphenol a in wastewater from wastepaper recycling plants". Chemosphere 44 (5). 973–9.
- [9] Hu JY; Aizawa T.; Ookubo S., Products of Aqueous Chlorination of Bisphenol A and Their Estrogenic Activity. Environmental Science & Technology 2002,36 (9), 1980-1987.
- [10] Frisch, M.J.T., G.W. et al , Gaussian 09, Revision D.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

- [11] Zhao, Y.; Truhlar, D., The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals. *Theor Chem Account* 2008,120 (1-3), 215-241.
- [12] Godbout, N.; Salahub, D. R.; Andzelm, J.; Wimmer, E., Optimization of Gaussian-type basis sets for local spin density functional calculations. Part I. Boron through neon, optimization technique and validation. *Canadian Journal of Chemistry* 1992,70 (2), 560-571.
- [13] Schafer, A.; Huber, C.; Ahlrichs, R., Fully optimized contracted Gaussian basis sets of triple zeta valence quality for atoms Li to Kr. *The Journal of Chemical Physics* 1994,100 (8), 5829-5835.
- [14] (a) Eichkorn, K.; Treutler, O.; Öhm, H.; Häser, M.; Ahlrichs, R., Auxiliary basis sets to approximate Coulomb potentials. *Chemical Physics Letters* 1995,240 (4), 283-290;(b) Eichkorn, K.; Weigend, F.; Treutler, O.; Ahlrichs, R., Auxiliary basis sets for main row atoms and transition metals and their use to approximate Coulomb potentials. *Theor Chem Account* 1997,97 (1-4), 119-124.

## Study on the Chlorine Derivatives of Bisphenol A Structure from the Density Functional Theory Approach

Vũ Văn Đạt<sup>1</sup>, Lê Kim Long<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Vietnam National University, 144 Xuân Thủy, Hanoi, Vietnam*

<sup>2</sup>*Center for Applied Informatics in Chemistry, Faculty of Chemistry, VNU University of Science*

**Abstract:** This article presents a theoretical investigation into some chlorine derivatives of Bisphenol A in gas phase. The Density Functional Theory (DFT) was utilized, using the M06 hybridmeta - GGA functionals with the *DGAUSSDZVP* and *TZVP* basis sets accompanying with *DGA1* and *TZVPfit* density fitting sets. These calculations focuses on finding the optimized molecular structures, vibrational frequencies, the molecular orbital energies with reasonable accuracy. Results obtained show that M06 method describes precisely configurations of all 4 chlorine derivatives of bisphenol A. When BPA was chlorinated there were some changes in electric density of molecules. Calculation results were matched well with those of experiments.

**Keywords:** Bisphenol A, Density Functional Theory, M06 hybridmeta - GGA functional.