บทคัดย่อ

รายงานนี้กล่าวถึงการสังเคราะห์และการศึกษาด้วยแบบจำลองโมเลกุลของสมบัติการรวมตัวกันของสารรับไอออนลบชนิดเอไมด์ เรื่องแรก ศึกษาโครงสร้างโมเลกุลของ 3,4-dichlor-2,5-diamidopyrrole สปีชีส์ที่สูญเสียโปรตอน สปีชีส์ไดเมอร์ที่รวมตัวกันเองและสารประกอบเชิงซ้อนกับฟลูออไรด์ คลอไรด์ และไฮดรอกไซด์โดยใช้การคำนวณ DFT โครงสร้างที่เหมาะสมของสปีชีส์ไดเมอร์ที่รวมตัวกันเองและมีเตตระบิวทิลแอมโมเนียมเคาเตอร์ไอออนแสดงถึงความสอดคล้องกับโครงสร้างผลึกทางเอกเรย์

เรื่องที่สอง หาโครงสร้างโมเลกุลของ 4-aminomethyl-phenylamino-bis-(3,4-dichloro-5-phenylcarbamoyl-1*H*-pyrrole-2-carboxamide) สปีชีส์ที่สูญเสียโปรตอนและสารประกอบเชิงซ้อนกับฟลูออไรด์ คลอไรด์ และไฮดรอกไซด์ได้โดยใช้วิธี DFT/B3LYP/6-31G(d) รายงานถึงพลังงานและค่าคงที่เทอร์โมไดนามิกและค่าคงที่สมดุลของกระบวนการสูญเสียโปรตอนของสารประกอบเมื่อมีและไม่มีฟลูออไรด์ คลอไรด์ และไฮดรอกไซด์ไอออน รวมทั้งของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนที่ได้จากการคำนวณระดับ B3LYP/6-31G(d) กับ ZPVE correction และ B3LYP/6-31+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d)

นอกจากนี้ได้ศึกษาสมบัติการรวมตัวกันของตัวรับไอออนลบชนิดไอโซพทาลาไมด์สามสารคือ *N,N′*-diphenylisophathalamide, *N,N′*-bis-(3-nitrophenyl)isophathalamide และ *N,N′*-bis-(3,5-dinitrophenyl)isophathalamide โดยใช้วิธีทางการคำนวณ หาโครงสร้างที่เหมาะสมและสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกของสารประกอบเชิงซ้อนของสารเหล่านี้กับฟลูออไรด์ คลอไรด์ และโบรไมด์ไอออน

สุดท้าย สังเคราะห์อนุพันธ์ไอโซพทาลาไมด์ *N,N′*-bis(4-nitrophenyl)isophthalamide และ *N,N′*-bis-(4-trifluoromethyl-phenyl)isophthalamide ศึกษาสมบัติการจับเฮไลด์โดยเทคนิคเอกเรย์สเปกโตรสโคปีแบบผลึกเดี่ยว นิวเคลียร์แมกนีติกเรโซแนนซ์สเปกโตรสโคปีพร้อมด้วยวิธีคำนวณ DFT

คำสำคัญ: เคมีโคออร์ดิเนชันของไอออนลบ, สมบัติการรวมตัว, สารรับไอออนลบชนิดเอไมด์, เคมีคำนวณ, ดีเอฟที

Abstract

This report describes the synthesis and molecular modeling study of assembly properties of amide based anion receptors. Firstly, the molecular structures of 3,4-dichlor-2,5-diamidopyrrole, its deprotonated species, self-assembly dimeric species and its fluoride, chloride and hydroxide complexes were obtained using the DFT calculations. The optimized structures of the self-assembly dimer co-existing with tetrabutylammonium counter ions show good agreement with its X-ray crystallographic structure.

Secondly, the molecular structures of the 4-aminomethyl-phenylamino-bis-(3,4-dichloro-5-phenylcarbamoyl-1*H*-pyrrole-2-carboxamide), its deprotonated species and the complexes with fluoride, chloride and hydroxide ions were obtained using the DFT/B3LYP/6-31G(d) method. Energetics, and thermodynamics and equilibrium constants of the deprotonation process of the compound in the presence and absence of the fluoride, chloride and hydroxide ions including their complexations calculated at the B3LYP/6-31G(d) level with ZPVE correction and the B3LYP/6-31+G(d,p)//B3LYP/6-31G(d) are reported.

Additionally, assembly properties of three isophtalamide based anion receptors, *N,N′*-diphenylisophathalamide, *N,N′*-bis-(3-nitrophenyl)isophathalamide, and *N,N′*-bis-(3,5-dinitrophenyl)isophathalamide were studied using the computational methods. Optimized structures and thermodynamic properties of their complexes with fluoride, chloride and bromide ions were investigated.

Finally, isophtalamide derivatives, *N,N′*-bis(4-nitrophenyl)isophthalamide and *N,N′*-bis-(4-trifluoromethyl-phenyl)isophthalamide, were synthesized. Their halide binding properties were studies *via* the single crystal X-ray Spectroscopy, nuclear magnetic resonance spectroscopy techniques and also the DFT calculation methods.

Keywords: Anion coordination chemistry, assembly properties, amide based anion receptors, computational chemistry, DFT