

## บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5380135

ชื่อโครงการ: สมบัติการจดจำไอออนลบของสารรับไอออนลบชนิดเอไมด์

ื่อนักวิจัย และสถาบัน: ผศ.ดร.กรกฎ นวคุณ มหาวิทยาลัยรามคำแหง

อีเมล: n\_korakot@ru.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี

### บทคัดย่อ:

สารรับไอออนลบชนิดเอไมด์สังเคราะห์ได้จาก *N,N'*-bis-(3,5-dichlorophenyl) isophthalamide (1) *N,N'*-bis-(3,5-difluorophenyl)isophthalamide (2) *N,N'*-bis-(3,5-bis-(trifluoromethyl)phenyl)isophthalamide (3) *N,N'*-bis-(3,5-dichlorophenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide (4) *N,N'*-bis-(3,5-difluorophenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide (5) *N,N'*-bis-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide (6) 2,6-bis(3,5-dichlorophenyl carbamoyl)pyridinium (7) 2,6-bis(3,5-difluorophenylcarbamoyl)pyridinium (8) และ 2,6-bis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenylcarbamoyl)pyridinium (9) ถูกเตรียมขึ้นและศึกษาโครงสร้างและสมบัติการจดจำไอออนลบโดยวิธีทางการคำนวณและการทดลอง โครงสร้างที่เหมาะสมและสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์หาได้จากทฤษฎี density functional theory (DFT) ที่ระดับ B3LYP/6-31G(d) ของทฤษฎีโดยวิธีทางเคมีคำนวณ และเทคนิคนิวเคลียร์แมกนีติกเรโซแนนซ์ไทดเดอร์ชันใช้เพื่อหาค่าคงที่การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน ( $K_{\text{asso}}$ ) ของสารเหล่านี้กับ tetrabutylammonium fluoride (TBAF) tetrabutylammonium chloride (TBACl) tetrabutylammonium bromide (TBABr) tetrabutylammonium dihydrogenphosphate (TBAH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>) tetrabutylammonium hydrogensulphate (TBAHSO<sub>4</sub>) และ tetrabutylammonium nitrate (TBANO<sub>3</sub>) ผลจากการทดลองเป็นไปตามการคำนวณที่สารรับไอออนลบชนิดไอโซพทาลาไมด์ (1, 2 และ 3) จับกับ H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>-</sup> อย่างจำเพาะเจาะจง

คำหลัก : เคมีโคออร์ดิเนชันของไอออนลบ เคมีคำนวณ สารรับไอออนลบชนิดเอไมด์ NMR ไทดเดอร์ชัน DFT

## Abstract

---

**Project Code :** MRG5380135

**Project Title :** Anion Recognition Properties of Amide Based Anion Receptors

**Investigator :** Asst. Prof. Dr. Korakot Navakhun, Ramkhamhaeng University

**E-mail Address :** n\_korakot@ru.ac.th

**Project Period :** 2 Years

### Abstract:

Nine synthetic amide based anion receptors, *N,N'*-bis-(3,5-dichlorophenyl)isophthalamide, **1**, *N,N'*-bis-(3,5-difluorophenyl)isophthalamide, **2**, *N,N'*-bis-(3,5-bis-(trifluoromethyl)phenyl)isophthalamide, **3**, *N,N'*-bis-(3,5-dichlorophenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide, **4**, *N,N'*-bis-(3,5-difluorophenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide, **5**, *N,N'*-bis-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)pyridine-2,6-dicarboxamide, **6**, 2,6-bis(3,5-dichlorophenyl)carbamoylpyridinium, **7**, 2,6-bis(3,5-difluorophenyl)carbamoylpyridinium, **8**, and 2,6-bis(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)carbamoylpyridinium, **9**, have been prepared and studied their structures and their anions recognitions using both computational and experimental methods. The optimized structures and thermodynamic properties have been investigated with the density functional theory (DFT) at the B3LYP/6-31G(d) level of theory. The nuclear magnetic resonance titration techniques have been also used to obtain their associate constants ( $K_{\text{asso}}$ ) with tetrabutylammonium fluoride (TBAF), tetrabutylammonium chloride (TBACl), tetrabutylammonium bromide (TBABr), tetrabutylammonium dihydrogenphosphate ( $\text{TBAH}_2\text{PO}_4$ ), tetrabutylammonium hydrogensulphate ( $\text{TBAHSO}_4$ ) and tetrabutylammonium nitrate ( $\text{TBANO}_3$ ). The experimental results show agreement with the theoretical results that the isophthalamide based receptors, **1**, **2** and **3**, bind  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  selectively.

**Keywords :** Anion coordination chemistry, computational chemistry, amide based anion receptor, NMR titration, DFT