

**Project Code** : MRG5580182

**Project Title** : The synthesis of novel biphenolic derivatives as fluorescent sensors for amino acids

**Investigator** : Dr. Boontana Wannalerse

**E-mail Address** : fscibnw@ku.ac.th

Project Period : 2 years

Abstract:

The receptors **L1** and **L2** based on binaphthyl derivative have been synthesized and characterized by FT-IR, ESI-MS,  $^1\text{H}$  NMR and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy and elemental analysis. The recognition properties of both receptors with guests (anions, chiral acids and amino acids) have been investigated by  $^1\text{H}$  NMR and UV-vis spectroscopy. In the presence of  $\text{F}^-$  ion, **L1** and **L2** were found to undergo deprotonation processes of the -NH moiety of the amide-nitrobenzene unit. This phenomena gave a color change from colorless to yellow because of internal charge transfer. **L1** and **L2** can identify the anions depending upon the basicity of anions. Moreover, chiral acids and amino acids were able to bind with them via hydrogen bonding interaction. Interestingly, **L1** and **L2** were the enantioselective sensor for Trp but they can not discriminate the enantiomer Trp. Job's plot measurement indicated that receptors bind guests (anions, chiral acids and amino acids) in 1:1 formation. The calculated DFT results were used to confirm the complexation between receptor **L1** and D-Trp using hydrogen bonding. The binding energy of complex is  $-25.91 \text{ kcal mol}^{-1}$ .

**Keywords** : deprotonation processes, binaphthyl derivative, enantioselective sensor

## บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5580182

ชื่อโครงการ : การสังเคราะห์อนุพันธ์ไบโอฟีนอลิกใหม่เพื่อเป็นตัวตรวจวัดฟลูออเรสเซนต์สำหรับกรดอะมิโน

ชื่อนักวิจัย : ดร. บุญนา วรรณเลิศ

อีเมลล์ : fscibnw@ku.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : 2 ปี

### บทคัดย่อ

รีเซปเตอร์ L1 และ L2 เตรียมจากอนุพันธ์ไบโอฟีนอลและทำการบ่งบอกลักษณะโดยเทคนิค FT-IR ESI-MS  $^1\text{H}$  NMR  $^{13}\text{C}$  NMR และ EA สมบัติการจดจำของรีเซปเตอร์ทั้งสองกับแกสต์(แอนไอออน กรดไครอล และกรดอะมิโน )สามารถตรวจสอบด้วยเทคนิค โปรตรอน เอ็นเอ็ม อาร์และ ยูวี วิส สเปกโทรสโกปี การมีอยู่ของฟลูออไรต์ไอออนทำให้ L1 และ L2 เกิดขบวนการโปรตรอนหลุดออกจาก NH ของหมู่เอมีดในดอร์เบนซิน ปรากฏการณ์นี้ทำให้เกิดการเปลี่ยนสีจากสารละลายไม่มีสีเป็นสีเหลือง เนื่องจากเกิดการเคลื่อนย้ายของประจุ L1 และ L2สามารถจำแนกแอนไอออนได้ตามความเป็นเบสของ แอนไอออน มากกว่านั้น กรดไครอลและกรดอะมิโนสามารถเกิดพันธะกับรีเซปเตอร์ผ่านพันธะ ไฮโดรเจนที่น่าสนใจ L1 และ L2เป็นเซนเซอร์สำหรับกรดอะมิโนแต่ไม่สามารถแยกแยะความเป็น อีแนนชิโอเมอร์ได้ การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนแบบ 1:1ระหว่างรีเซปเตอร์กับแกสต์(แอนไอออน กรดไครอล และกรดอะมิโน )สามารถตรวจวัดจากวิธี Job's plot การคำนวณDFTช่วยยืนยันการเกิดพันธะ ไฮโดรเจนระหว่าง L1 และ ทรีปโตฟาน ได้ค่าพลังงานเท่ากับ  $-25.91 \text{ kcal mol}^{-1}$

คำสำคัญ: ขบวนการโปรตรอนหลุด อนุพันธ์ไบโอฟีนอล เซนเซอร์อีแนนชิโอเมอร์