

**SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF
CHIRAL MOLECULES BASED ON
BIS(BENZIMIDAZOLE)ANTHRACENE-ADDUCT**



**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE
(APPLIED ANALYTICAL AND INORGANIC CHEMISTRY)
FACULTY OF GRADUATE STUDIES
MAHIDOL UNIVERSITY
2008**

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

การสังเคราะห์และการวิเคราะห์คอนฟอร์เมชันของโมเลกุลไครอลบิสเบนซิมิดาโซลซึ่งมีแอนทราซีน-แอคติกเป็นองค์ประกอบ

(SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF CHIRAL MOLECULES BASED ON BIS(BENZIMIDAZOLE)ANTHRACENE-ADDUCT)

วิโรจน์ สักดาฤทธิบุรี 4636328 SCAI/M

วท.ม.(เคมีวิเคราะห์และเคมีอินทรีย์ประยุกต์)

คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์: เอกสิทธิ์ สมสุข, Ph.D.(CHEMISTRY),
เทียนทอง ทองพันชั่ง, Ph.D.(CHEMISTRY), กัมภีร์ พรหมพราย, Ph.D.(INORGANIC
CHEMISTRY), จงกล จารุภัทรากร, Ph.D.(CHEMISTRY)

บทคัดย่อ

ในวิทยานิพนธ์นี้, ลิแกนด์ถูกสังเคราะห์โดยการรวมแอนทราซีน-แอคติกเข้าไปเป็นตัวเชื่อมในตำแหน่ง 1,2 ของเบนซิมิดาโซล (เบนซิมิดาโซล ไครอล). สารประกอบเชิงซ้อนของเงิน(I) และทองแดง(II) ไอออนถูกเตรียมขึ้นเพื่อเป็นโครงสร้างต้นแบบสำหรับการเร่งปฏิกิริยา. สารประกอบเชิงซ้อนของลิแกนด์นี้กับทองแดง(II) ไอออนถูกใช้เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาในปฏิกิริยาไม่สมมาตรเฮนรีของ *O*-nitrobenzaldehyde กับ nitromethane.

ความยืดหยุ่นและการวิเคราะห์คอนฟอร์เมชันของ bis(benzimidazole)anthracene-adduct ถูกศึกษาโดยการคำนวณมอนติคาร์โลกลศาสตร์โดยใช้โปรแกรม Macromodel เวอร์ชัน 8.1 และใช้ MM2+ force field ใน DMSO ที่อุณหภูมิ 300 เคลวิน. ผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำที่สุดจะอยู่ในรูปของตรงข้าม.

อุปสรรคการหมุนของพันธะเดี่ยวของ bis(benzimidazole)anthracene-adduct และอนุพันธ์ถูกศึกษาโดยการคำนวณ dihedral driving กลศาสตร์ใน DMSO ที่อุณหภูมิ 300 เคลวิน. ผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำที่สุดจะอยู่ในรูปของตรงข้าม.

68 หน้า

**SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF CHIRAL MOLECULES
BASED ON BIS(BENZIMIDAZOLE)ANTHRACENE-ADDUCT.**

VIROJ SAKDALITBUREE 4636328 SCAI/M

M.Sc.(APPLIED ANALYTICAL AND INORGANIC CHEMISTRY)

THESIS ADVISORS: EKASITH SOMSOOK, Ph.D.(CHEMISTRY),
TIENTONG THONGPANCHANG, Ph.D.(CHEMISTRY),
KHAMPHEE PHOMPRAI, Ph.D.(INORGANIC CHEMISTRY),
JONGGOL JARUPATRAKORN, Ph.D.(CHEMISTRY).**ABSTRACT**

In this thesis, the ligand were designed by incorporating anthracene-adduct as a connecting unit in 1,2 position of benzimidazole (chiral benzimidazole). Chiral benzimidazole Ag(I) and Cu(II) complexes were prepared as model structures for catalysis. This ligand was also used for Cu(II)-promoted asymmetric Henry reaction of *o*-nitrobenzaldehyde with nitromethane.

The flexibility and conformational analysis of bis(benzimidazole)anthracene-adduct were carried out by Monte Carlo (MC) MM calculation using Macromodel v8.1 software and a MM2+ force field in DMSO at 300 K. The results showed that the lowest energy conformer is an *anti* structure.

The rotational barrier of single-bond rotations of bis(benzimidazole)anthracene-adduct and derivatives was further carried out by MM dihedral driving calculations in DMSO at 300 K. The results showed that the lowest energy conformer of bis(benzimidazole)anthracene-adduct was the *anti*-structure.

KEY WORDS: BENZIMIDAZOLE/ ANTHRECENE-ADDUCT/ CHIRAL
BENZIMIDAZOLE/HENRY REACTION / MONTE CARLO
(MC)/ POTENTIAL ENERGY/ FLEXIBILITY

68 pp.