

โครงสร้างโมเลกุลของ 1,3-ฟีนิลีน-บิส-(3,4-ไดคลอโร-5-ฟีนิลคาร์บาโมอิล-1*H*-ไพโรล-2-คาร์บอกไซคลิก แอซิด) (L^1H_2), 1,4-ฟีนิลีน-บิส-(3,4-ไดคลอโร-5-ฟีนิลคาร์บาโมอิล-1*H*-ไพโรล-2-คาร์บอกไซคลิก แอซิด) (L^2H_2), สปีชีส์ของสารประกอบทั้งสองที่เสียโปรตอน และสารประกอบเชิงซ้อนของสารประกอบทั้งสองนี้กับฟลูออไรด์ คลอไรด์ และไฮดรอกไซด์ไอออน ถูกคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมโดยทฤษฎีเค้นซิติ ฟังก์ชันนัล (DFT) จากการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) พบว่าสปีชีส์ที่เสียโปรตอนของสารประกอบทั้งสอง (L^{1-2} และ L^{2-2}) แสดงผลที่ได้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับโครงสร้างผลึกทางเอ็กซ์เรย์สเปกโตรสโคปี

พลังงาน สมบัติทางเทอร์โมไดนามิกและค่าคงที่สมดุลของกระบวนการถ่ายโปรตอนของสารประกอบทั้งสองในระบบที่มีและไม่มีฟลูออไรด์ คลอไรด์ และไฮดรอกไซด์ไอออน คำนวณหาได้จากทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) และ ZPVE correction

พบว่าในสถานะของแข็ง สปีชีส์ L^{1-2} (โครงสร้าง W-like) มีความเสถียรน้อยกว่าสปีชีส์ L^{2-2} (โครงสร้าง S-like) เท่ากับ 88.04 kcal.mol⁻¹ ในสถานะก๊าซ ฟลูออไรด์ไอออนสามารถเกิดสารประกอบเชิงซ้อนที่เสถียรกับสปีชีส์ที่เสียโปรตอนของสารประกอบทั้งสอง ในรูป $[LH_2F]^-$ และ $[LH_2F]^{2-}$ ในขณะที่ ระบบสารประกอบเชิงซ้อนทั้งสองกับคลอไรด์ไอออน พบว่าสปีชีส์ $[LH_2Cl]^-$ และ $[LH_2Cl]^{2-}$ มีความเสถียรสูง ส่วนในระบบของไฮดรอกไซด์ไอออน สปีชีส์ที่อยู่ในรูปไฮเดรต ได้แก่ $[L(H_2O)]^{2-}$ และ $[L(H_2O)_2]^{2-}$ เป็นสปีชีส์ที่เสถียร

The molecular structures of 1,3-phenylene-bis-(3,4-dichloro-5-phenylcarbamoyl-1*H*-pyrrole-2-carboxylic acid amide), ($\mathbf{L}^1\text{H}_2$), 1,4-phenylene-bis-(3,4-dichloro-5-phenylcarbamoyl-1*H*-pyrrole-2-carboxylic acid amide), ($\mathbf{L}^2\text{H}_2$), their deprotonated species and fluoride, chloride and hydroxide complex were obtained by geometry optimisations using density functional theory (DFT) calculations. The B3LYP/6-31G(d)-optimized geometries of deprotonated species for both compounds (\mathbf{L}^{1-2-} and \mathbf{L}^{2-2-}) show good agreement with their X-ray crystallographic structures.

Energetics, thermodynamic properties and equilibrium constants of deprotonation and complexation processes of both compounds in the presence and absence of fluoride, chloride and hydroxide ions were also computed at the B3LYP/6-31G(d) level with ZPVE corrections.

In solid phase, the species \mathbf{L}^{1-2-} (W-like structure) is less stable than the \mathbf{L}^{2-2-} (S-like structure) by 88.04 kcal.mol⁻¹. In gas phase, the fluoride ions are able to form stable complexes with the deprotonated species of the compounds in forms of $[\mathbf{LH}_2\text{F}]^-$ and $[\mathbf{LH}_2\text{F}]^{2-}$. Whereas, both complex systems with chloride ion, the $[\mathbf{LH}_2\text{Cl}]^-$ and $[\mathbf{LH}_2\text{Cl}_2]^{2-}$ species show high stabilities and for the system with hydroxide ion, the hydrated-forms as $[\mathbf{L}(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$ and $[\mathbf{L}(\text{H}_2\text{O})_2]^{2-}$ species are dominant species.