T164808

บทคัดย่อ

ผู้วิจัยได้ศึกษาผลของตัวทำละลายต่อการแตกตัวของโปรตอนในสารจำกลุ่มsubstitituted guanidines ซึ่งเป็นองค์ประกอบในตัวยา cimetidine แก้โรคกระเพาะ และสารที่มีสมบัติเป็นสีย้อม (dye indicators) ค่า pK_a ซึ่งแสดงถึงความเป็นกรดในตัวทำละลายน้ำถูกทำนายโดยใช้วัฏจักรเทอร์โมไดนามิกส์และแบบจำลองทางเคมีควอนตัม โดยผลของตัวทำละลายจะพิจารณาโดยใช้ continuum solvation model ส่วนค่าพลังงานการแตกตัวของโปรตอนในสถานะแก๊สได้ใช้วิธี ONIOM(G2MS) พบว่าค่า pK_a ที่คำนวณได้มีความถูกต้องโดยมีค่า standard error ประมาณ 0.9 หน่วยในกรณีของ substituted guanidine ส่วนกรณีของ dye indicators มีค่าประมาณ 0.5 ซึ่งคาดว่าเทคนิคการคำนวณนี้สามารถนำไปใช้ในระบบอื่น หรือนำไปหาค่าสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์ค่าอื่นได้เช่นค่าครึ่งเซลล์ไฟฟ้ารีดอกซ์

Abstract

TE 164808

We investigate the solvent effect on the acidity of substituted guanidines which is a chemical group in cimetidine, an anti peptic-ulcer drug, and in a series of dye indicators which change their colour upon changing the protonation state. The pK_a which quantifies the acidity in solution phase such as in liquid water is predicted by using the thermodynamic cycle and the quantum chemical model. The solvent effect was described by using the continuum solvation model whereas the proton dissociation energy in the gaseous state was evaluated by using the size-and-accuracy extrapolation ONIOM(G2MS) method. The calculations resulted in the standard error of pK_a of 0.9 units for the substituted guanidine systems and 0.5 units for the dye indicator systems considered. This methodology should be applicable for other systems as well as for other thermodynamic quantities such as a half-cell redox potential.