

การคำนวณโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างสารประกอบอะซิฟีนอล-ไรโอยูเรีย (1 และ 2) สารประกอบเตตระอะมิโน-เทอร์เชียรี-บิวทิลโรอาคาลิก[4]เอรีน (tatbtc4a) และ สารประกอบเตตระอะมิโน-เทอร์เชียรี-บิวทิลคาลิก[4]เอรีน (tatbc4a) กับแอนไอออน อะซิเตด อ็อกซาเลต มาโลเนต ซักซิเนต กลูตาเรต อะดิเพต ฟิมิเลต ซับเบอเรต และ อะซิเนต โดยวิธีอินทิเกรต MO:MO พลังงานรวมตัวและพลังงานการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างไฮสด์และเกสต์เหล่านี้ ได้รับจากการคำนวณโดยวิธี ONIOM2 (B3LYP/6-31G(d):AM1) ลำดับความเสถียรของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างสารประกอบ 1 2 tatbtc4a และ tatbc4a กับแอนไอออนได้รับการรายงาน อันตรปฏิบัติกริยาการรวมตัวระหว่าง สารประกอบ 1 2 tatbtc4a และ tatbc4a กับคาร์บอซาลेट พบว่าเกิดพันธะไฮโดรเจนแบบหลายจุด ค่าเทอร์โมไดนามิกของการรวมตัวของสารประกอบเชิงซ้อน ค่าพลังงานการปรับโครงสร้าง และพลังงานการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนได้รับการคำนวณ ค่าสัมประสิทธิ์การเลือกเฉพาะของไฮสด์ tatbtc4a และ tatbc4a ต่อไอออนมาโลเนต เทียบกับ อ็อกซาเลต $K_{\text{malonate}}^{\text{oxalate}}$ เท่ากับ 9.90×10^2 and 1.09×10^2 ตามลำดับ

Geometries of complexes of azophenol-thiourea derivatives (1 and 2), tetraamino-tert-butylthiacalix[4]arene (tatbtc4a) and tetraamino-tert-butylcalix[4]arene (tatbc4a) with acetate, oxalate, malonate, succinate, glutarate, adipate, pimelate, suberate and azelate were carried out using the integrated MO:MO method. The binding and complexation energies of these complexes were derived from the ONIOM(B3LYP/6-31G(d):AM1) calculations. The relative stabilities of the complexes of azophenol-thiourea derivatives, tatbtc4a and tatbc4a with carboxylate guests are reported. The binding interactions between the azophenol-thiourea receptor 1, 2, tatbtc4a and tatbc4a and carboxylate guests are described as multipoints hydrogen bonding. Thermodynamic properties of binding interactions between receptors 1, 2, tatbtc4a and tatbc4a and their preorganizations and complexations are obtained. Selectivities of the receptors tatbtc4a and tatbc4a toward to malonate with respect to oxalate, in terms of selectivity coefficient, $K_{malonate}^{oxalate}$ are 9.90×10^2 and 1.09×10^2 , respectively.