

Nuwe gasheerstowwe *N,N'*-bis(9-sikloheksyl-9-xantheniel)etileendiamien en *N,N'*-bis(9-sikloheksyl-9-tioxantheniel)etileendiamien: 'n Ondersoek na hul insluitingsvermoë

Outeurs:

Ulrich Senekal,
B Barton

Affiliatie:

Departement Chemie,
Nelson Mandela Universiteit
Posbus 77000, Port
Elizabeth, 6031

Korresponderende outeur:

U Senekal
E-pos:
s214099601@mandela.ac.za

Hoe om hierdie artikel aan te haal:

Ulrich Senekal, B Barton,
Nuwe gasheerstowwe
N,N'-bis(9-sikloheksyl-9-xantheniel)etileendiamien
en *N,N'*-bis(9-sikloheksyl-9-tioxantheniel)etileendiamien: 'n Ondersoek na hul insluitingsvermoë, *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 38(1) (2019).
<https://doi.org/10.36303/SATNT.2019.38.1.777>

Kopiereg:

© 2019. Authors.
Licensee: *Die Suid-Afrikaanse Akademie vir Wetenskap en Kuns*.
Hierdie werk is onder die Creative Commons Attribution License gelisenseer.

Novel host compounds *N,N'*-bis(9-cyclohexyl-9-xanthenyl)ethylenediamine and *N,N'*-bis(9-cyclohexyl-9-thioxanthenyl)ethylenediamine: An investigation of their inclusion ability: Host compound *N,N'*-bis(9-cyclohexyl-9-xanthenyl)ethylenediamine formed complexes with pyridine, 3-methylpyridine and 4-methylpyridine with a host:guest ratio of 1:1, 2:1 and 1:2, respectively. Very interestingly, the structurally related host compound *N,N'*-bis(9-cyclohexyl-9-thioxanthenyl)ethylenediamine only included pyridine with a H:G ratio of 1:1. The competition experiments show a selectivity order of 4MP >> PYR > 3MP > 2MP for Host 1, whereas no selectivity was seen for Host 2.

N,N'-bis(9-sikloheksiel-9-xantfeniel)etileendiamien en *N,N'*-bis(9-sikloheksyl-9-tioxanofeniel)etileendiamien is met 'n bekende sintetiese proses berei en hul gasheerpotensiaal is met piridien en die metielpiridienisomere geëvalueer. Soortgelyke gasheerstowwe het isomeerskeidingsvermoëns getoon. Isomeerskeiding is 'n belangrike proses in die chemiese en farmaseutiese bedryf, aangesien opties suiwer isomere benodig word vir dwelm-, plaagdoder- en onkruidoddersintese. Die skeiding van organiese industriële chemikalieë, insluitend xyleen, kresole, fenole en piridien, is 'n belangrike taak in die chemiese bedryf. Gasheer-gaschemie kan as 'n alternatiewe metode vir huidige skeidingsmetodologieë soos fraksionele distillasie, fraksionele kristallasie en kolomchromatografie vir die skeiding van isomeermengsels oorweeg word. Gasheer-gaschemie het verskeie toepassings in wetenskaplike velde en word gebruik in dwelmaflewering en om gevaarlike materiale uit die omgewing te verwyder deur hulle in 'n moontlik minder gevaarlike toestand te berg. Hulle word ook in die skeiding van isomere en struktuurverwante verbindinge gebruik.

Die enkel-oplosmiddel eksperimente het getoon dat Gasheer 1 piridien, 3-metielpiridien en 4-metielpiridien ingesluit het met 'n gasheer-gasverhouding van onderskeidelik 1:1, 2:1 en 1:2. Die eksperimente het ook getoon dat Gasheer 2 slegs piridien ingesluit het met 'n gasheer-gasverhouding van 1:1. Kompetisie-eksperimente is daarna met die gaste op die gasheer uitgevoer. Die kompetisie-eksperimente met Gasheer 1 het aangedui dat piridien in die afwesigheid van 4-metielpiridien bevoordeel is. Die eksperimente het ook getoon dat 4-metielpiridien bevoordeel is wanneer dit in 'n mengsel teenwoordig was. Die isomeer 3-metielpiridien is slegs bevoordeel vir die 2MP/3MP ekwimolêre-binêre mengsel. Die 2-metielpiridien-gas is nooit in enige van die kompetisie-eksperimente bevoordeel nie. Die ternêre kompetisie-eksperimente wat PYR/2MP/3MP, PYR/2MP/4MP en PYR/3MP/4MP gebruik het, het nie insluitingskomplekse gevorm nie. Die binêre, ternêre en kwaternêre kompetisie-eksperimente van PYR, 2MP, 3MP en 4MP met Gasheer 2 het geen insluitingskomplekse gevorm nie, hoewel Gasheer 2 'n insluitingskompleks gevorm het met net die piridien-gas.

Die enkel-kristal X-straaldiffraksie-ontledings het getoon dat die gaste in die 1•PYR en 1•3MP komplekse diskrete holtes gevul het. Daar is ook opgemerk dat twee 4-metielpiridien-gaste en vier piridien-gaste 'n enkele holte in die 1•4MP en 2•PYR-komplekse beset. Al vier komplekse het π - π -interaksies getoon, maar slegs die 1•MP- en 2•PYR-komplekse vertoon 'n enkele gas-gas- π - π -interaksie. Die 1•4MP-kompleks was ook die enigste kompleks om 'n waterstofbinding tussen die waterstof van die stikstofatoom van die gasheer en die stikstof van

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 25–26 Oktober 2018, SA Akademiegebou, Pretoria, Suid-Afrika. Gasredakteurs: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Prof Chris Swanepoel (Departement Besluitkunde, Universiteit van Suid-Afrika); Me Andrea Lombard (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika)

die 4-metielpiridiengas te toon. Hierdie (gasheer) $\text{NH}\cdots\text{N-C}$ (gas) interaksie help om die 4-metielpiridienegaste in die 1•4MP-kompleks te hou deur slegs een oriëntering van die gas in die kompleks toe te laat. Die 1•4MP-kompleks is die enigste kompleks van Gasheer 1 om 'n waterstofbinding tussen die gasheer en die gas te vertoon.

Die gaste van al vier die komplekse is in 'n stapsgewyse proses vrygestel. Die gaste van die 1•4MP-kompleks, in vergelyking met die gaste van die ander komplekse, is teen 'n hoër temperatuur vrygestel. Die resultaat het getoon dat die 1•4MP-kompleks 'n hoër termiese stabiliteit gehad het wat met die selektiwiteitsvolgorde korreleer. Die gaste van die 1•3MP-kompleks is voor die gaste van die 1•PYR-

kompleks vrygestel. Die resultaat dui die teenoorgestelde van die selektiwiteitsvolgorde aan. Gasheer 1 het tussen 202-212°C gesmelt terwyl Gasheer 2 by 'n maksimum temperatuur van 215.84°C vir die 2•PYR-kompleks gesmelt het. Die eksperimentele massaverliese vir die 1•PYR-, 1•3MP-, 1•4MP- en 2•PYR-komplekse het ooreengestem met die verwagte massaverlieswaardes.

Daar is bevind dat Gasheer 1 'n effektiewe gasheer skyn te wees vir die skeiding van piridien en sy metielpiridien-isomere. Gasheer 2 het slegs piridien in die afwesigheid van die metielpiridien ingesluit en is nie 'n effektiewe gasheer by die skeiding van piridien en die metielpiridien-isomere nie.