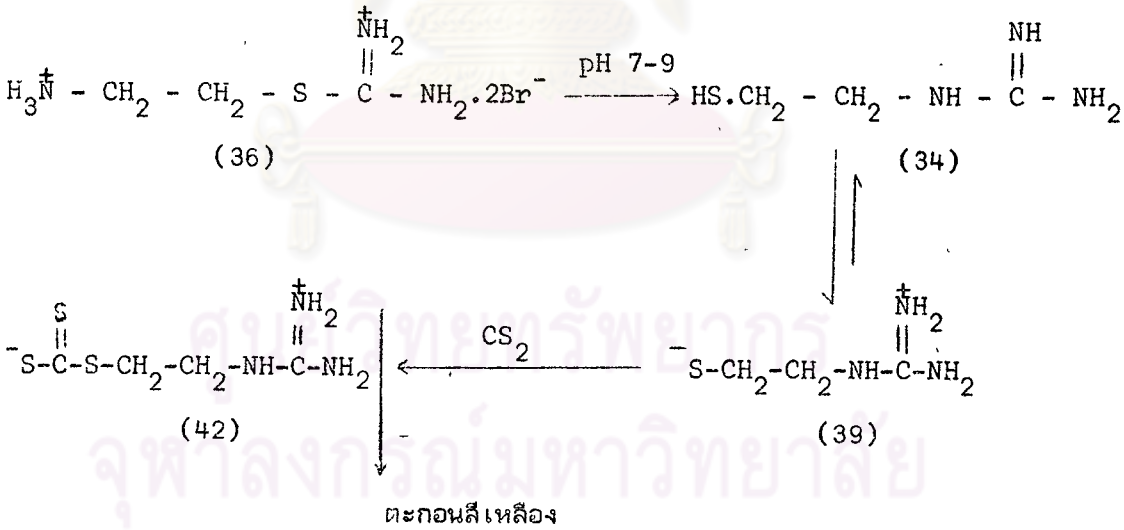
หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง

เมื่อนำ 2 อะมิโนไอโซไธโอยูโรเนี่ยมโบรไมด์ ไฮโดรโบรไมด์ (36) ละลายในน้ำ แล้วทำให้สภาพความเป็นกรด (pH) ของสารละลายประมาณ 7-9 ด้วยสารละลายแอมโมเนียในน้ำ จะเกิดการจัดเรียงตัวของอะตอมใหม่ภายในโมเลกุลของมันเอง เป็นปฏิกิริยาที่เรียกว่า "อินทราทรานส์กวานีลเลชั่น" แล้วกลายเป็น 2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (34) โดยอยู่ในสภาพสมดุล กันระหว่างสารดังนี้ซึ่งไม่มีประจุ กับสวิทเธอเรี่ยน (39) ของมัน ซึ่งเป็นสารที่มีประจุบวกและลบอยู่ในโมเลกุลเดียวกัน และสามารถแยกออกมาได้ ครั้นเมื่อให้ทำปฏิกิริยากับคาร์บอนไดซัลไฟด์ จะเกิดเป็นตะกอนสีเหลืองของ 2-กวานีดีโนเอธิลไธรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42) ดังแสดงไว้ในรูปที่ 12

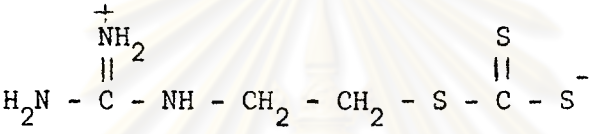


รูปที่ 12 ปฏิกิริยาการสังเคราะห์ 2-กวานีดีโนเอธิลไธรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42) จาก 2-อะมิโนไอโซไธโอยูโรเนี่ยมโบรไมด์ ไฮโดรโบรไมด์ (36)

เราสามารถพิสูจน์สูตรโครงสร้างของ 2-กัวนีดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน(42) ที่สังเคราะห์ได้โดยการวิเคราะห์ปริมาณธาตุซึ่งปรากฏว่าได้ผลถูกต้องใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการคำนวนตามทฤษฎีและจาก IR, NMR สเปคตรัม ซึ่งได้แสดงยอด (peak) ที่สำคัญไว้ในตารางที่ 2 และ 3 ตามลำดับ

ตารางที่ 2

IR สเปคตรัมของ 2-กัวนีดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนตสวิทเธอเรี่ยน (42)



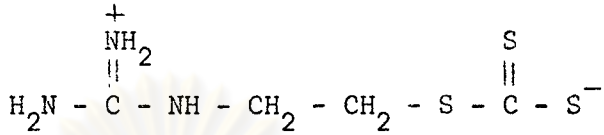
(42)

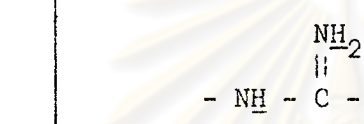
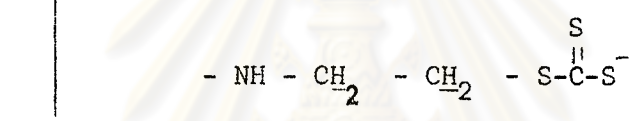
การยืดหดของพันธะ	กลุ่ม	ซม$^{-1}$
N - H		3100 - 3360
C ⇌ N		1650
C = S		1040

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 3

NMR สเปคตรัมของ 2-กวานิดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42)



จำนวนโปรตอน	กลุ่ม	S
5		6.0 - 7.1
4		3.1 - 3.5

สำหรับการสังเคราะห์สารอนุพันธ์เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานิดีนไฮโดรคลอไรด์ (41) นั้น ทำได้โดยการนำเอา 2-กวานิดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42) ที่ได้มาทำปฏิกิริยาโดยตรงกับสารอนุพันธ์ เอซิลคลอไรด์ (acyl chloride) (43) ที่เป็นอาลิฟฟาติคไฮโดรคาร์บอน (aliphatic hydrocarbon) ชนิดต่าง ๆ ดังแสดงไว้ในตารางที่ 4 พร้อมกับจุดเดือดของสารเหล่านี้

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 4

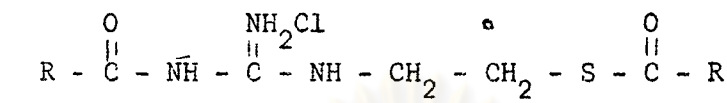
สารอนุพันธ์เอซิลคลอไรด์ (43) ($R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-Cl$) ที่ใช้ในการสังเคราะห์สารอนุพันธ์ N,S-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์(41)

R -	จุดเดือด (^{0}ซ)
CH_3-	52
C_2H_5-	78
C_3H_7-	102
C_4H_9-	126
iso - C_4H_9-	116
$C_5H_{11}-$	153
$C_6H_{13}-$	175
$C_7H_{15}-$	196
$C_8H_{17}-$	215
$C_9H_{19}-$	230
$C_{10}H_{21}-$	-
$H_2C = CH - C_8H_{16}-$	120 - 122/10 mmHg

ปรากฏว่าเมื่อนำ 2-กวานีดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42) มารีฟลักซ์ (reflux) กับสารอนุพันธ์เอซิลคลอไรด์ (43) เพื่อให้ได้สารอนุพันธ์เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (41) ผลที่เกิดขึ้นจากปฏิกริยาอันนี้ได้แสดงไว้ในตารางที่ 5

ตารางที่ 5

สารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (41)



สารประกอบ	R-	จุดหลอมเหลว (°ซ)		ผลที่ได้คิดเป็นร้อยละ		ผลการวิเคราะห์หาปริมาณธาตุที่เป็นองค์ประกอบ					
		ที่พบ	รายงาน[23]	ที่พบ	รายงาน[23]	C		H		N	
						คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ
49	C_5H_{11}-	81-82	83-86	26	26	—	—	—	—	—	—
50	C_6H_{13}-	83-84	87-89	22	22	—	—	—	—	—	—
51	C_7H_{15}-	92-93	94-95	54	54	—	—	—	—	—	—
52	C_8H_{17}-	95-96	—	92	-	57.86	57.27	9.64	9.12	9.64	9.89
53	C_9H_{19}-	99-100	—	96.8	-	59.54	59.72	9.92	9.71	9.06	8.94
54	$C_{10}H_{21}$-	104-105	—	100	-	61.04	61.04	10.17	10.23	8.55	8.52
55	$C_{10}H_{19}$-	85-86	—	100	-	61.28	61.78	9.81	9.58	8.58	8.37

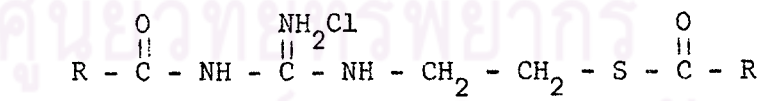
จากตารางที่ 5 จะเห็นว่า การสังเคราะห์สารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์ (41) จากปฏิกริยาโดยตรงระหว่าง 2-กวานีดีโน-เอธิลไตรไธโอคาร์บอเนตสวิทเธอเรี่ยน (42) กับสารอนุพันธ์ เอซิลคลอไรด์ (43) จะทำได้ก็ต่อเมื่อสารอนุพันธ์เอซิลคลอไรด์ (43) ที่ใช้มีกลุ่มแอลคีลที่ใหญ่ตั้งแต่ C_5H_{11}- เป็นต้นไป เพราะว่าจุดเดือดของสารเหล่านี้จะสูงกว่า 153 องศา°ซ. (ดูตารางที่ 4 ประกอบ) ซึ่งสูงกว่าจุดหลอมเหลวของ 2-กวานีดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนตสวิทเธอเรี่ยน (42) (จุดหลอมเหลว = 138-139° ซ) เมื่อให้ความร้อนก็สามารถทำให้ 2-กวานีดีโนเอธิลไตรไธโอคาร์บอเนต สวิทเธอเรี่ยน (42) หลอมเหลวและละลายเข้าเป็นเนื้อเดียวกัน ปฏิกิริยาจึงเกิดขึ้น

ขึ้น และให้สารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (41) ตามต้องการ (สารประกอบ 49-55) แต่ถ้าใช้สารอนุพันธ์เอซิลคลอไรด์ที่มีกลุ่มแอลคีลเล็กกว่า C_5H_{11} คือ CH_3-, C_2H_5-, C_3H_7-, n-C_4H_9 และ iso-C_4H_9- จุดเดือดของมันจะต่ำกว่าจุดหลอมเหลวของ 2-กวานีดีโนเอธิลไตรไธโอคารับอเนตสวิทเธอเรี่ยน(42) ดังนั้นแม้ว่าเราจะให้ความร้อนจนถึงจุดเดือดของสารเหล่านี้ก็ไม่สามารถจะทำให้ 2-กวานีดีโนเอธิลไตรไธโอคารับอเนต สวิทเธอเรี่ยนหลอมเหลวได้ ทำให้สารที่จะทำปฏิกิริยากันไม่สามารถละลายเข้าเป็นเนื้อเดียวกัน เป็นสารที่อยู่คนละสถานะกัน จึงไม่อาจจะเกิดปฏิกิริยาขึ้นได้

จากตารางที่ 5 จะเห็นว่าผลที่ได้คิดเป็นร้อยละจากปฏิกิริยาการสังเคราะห์สารที่ต้องการ เมื่อใช้สารอนุพันธ์เอซิลคลอไรด์ (43) ที่มีกลุ่มแอลคีลเป็น C_5H_{11}-, C_6H_{13}- และ C_7H_{15}- ยังต่ำมาก เมื่อเทียบกับตัวอื่น ๆ จึงได้พยายามศึกษาหาวิธีการสังเคราะห์เพื่อจะให้ได้ผลดีขึ้น ผลจากการทดลองพบว่าเมื่อเติมไพริดีน (pyridine) ลงไปเพียงไม่เกิน 0.5 มิลลิลิตร จะให้ผลที่ได้คิดเป็นร้อยละมากขึ้น ดังได้แสดงเปรียบเทียบไว้ในตารางที่ 6

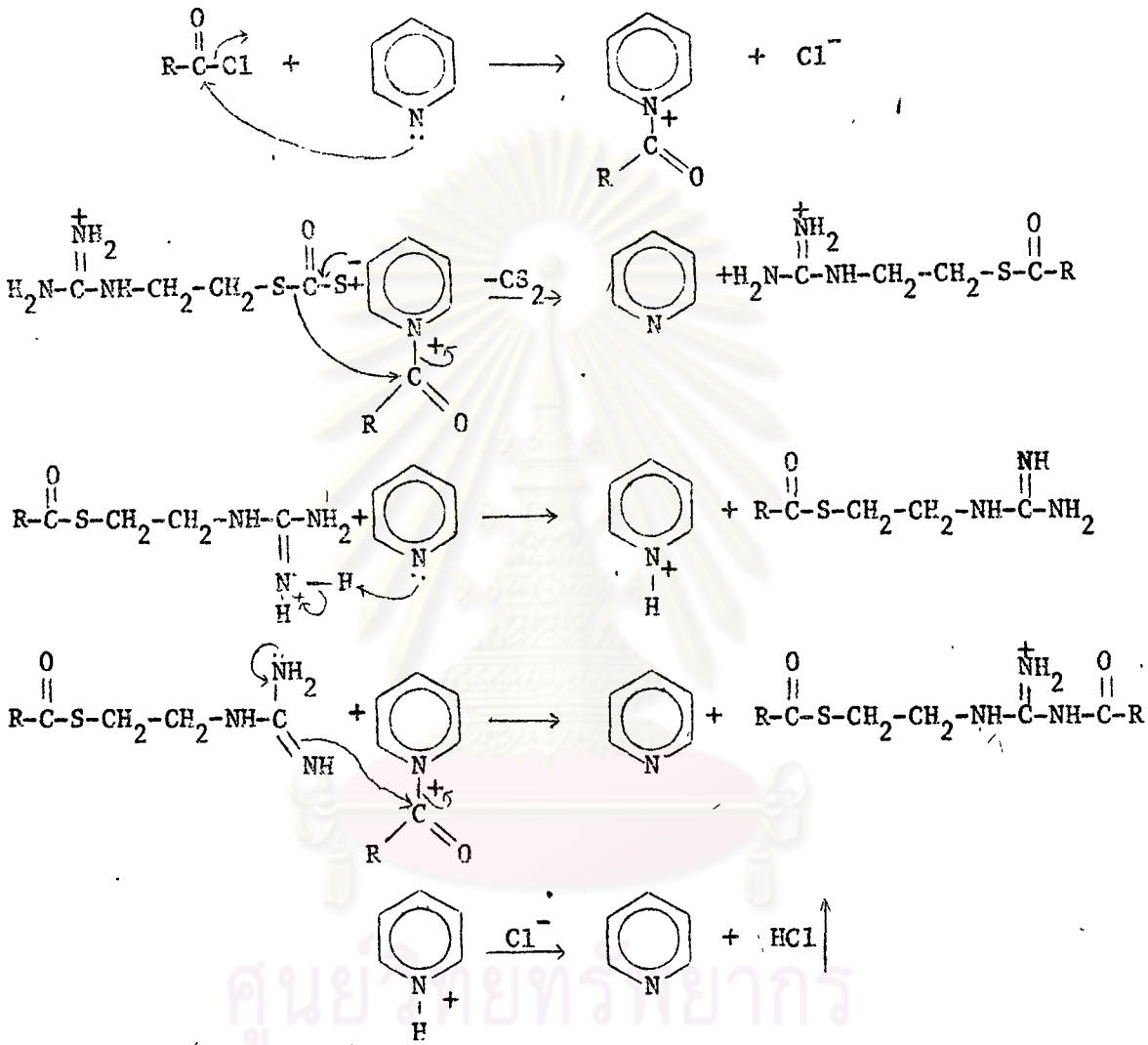
ตารางที่ 6

เปรียบเทียบผลที่ได้คิดเป็นร้อยละของสารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (41) บางตัวระหว่างปฏิกิริยาที่มีการเติมไพริดีนลงไปจำนวนเล็กน้อยกับปฏิกิริยาที่ไม่มีการเติมไพริดีน



สารประกอบ	R-	ผลที่ได้คิดเป็นร้อยละ		
		เมื่อไม่มีไพริดีน		เมื่อเติมไพริดีน
		รายงาน[23]	พบ	
48	C_5H_{11}-	26	26	73.4
49	C_6H_{13}-	22	22	83.4
50	C_7H_{15}-	54	54	88.5

เข้าใจว่าไพริดีนเข้าไปมีส่วนในกลไกของปฏิกิริยาดังแสดงไว้ในรูปที่ 13



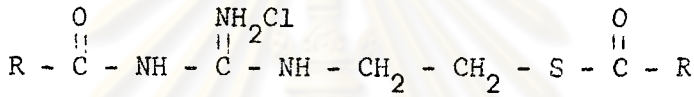
(41)

รูปที่ 13 กลไกของปฏิกิริยาการสังเคราะห์สารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล 2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์(41)โดยมีไพริดีนอยู่ด้วยเป็นจำนวนเล็กน้อย

เราสามารถพิสูจน์สูตรโครงสร้างของสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์ (41) ที่สังเคราะห์ได้โดยการวิเคราะห์ปริมาณธาตุ ซึ่งปรากฏว่าได้ผลถูกต้องใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการคำนวนตามทฤษฎี และจาก IR, NMR สเปคตรัม ซึ่งได้แสดงยอดที่สำคัญไว้ในตารางที่ 7 และ 8 ตามลำดับ

ตารางที่ 7

IR สเปคตราของสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์(41)



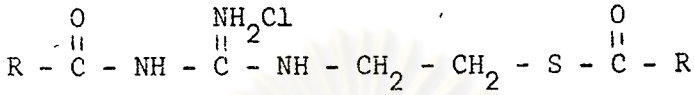
(41)

การยืดหดของพันธะ	กลุ่ม	ซม$^{-1}$
N - H	- NH - C(=NH_2Cl) - NH -	3050 - 3350
C = O	- S - C(=O) - R	1670 - 1710
C = N	>C = NH_2Cl	
C = O	- NH - C(=O) -	1560 - 1590 1620 - 1640
C = CH_2[1]	>C = CH_2	900

[1] เฉพาะใน เอน,เอส-ได-10-อุนเดคคีโนอิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์(54)

ตารางที่ 8

NMR สเปคตราของสารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์(41)



(41)

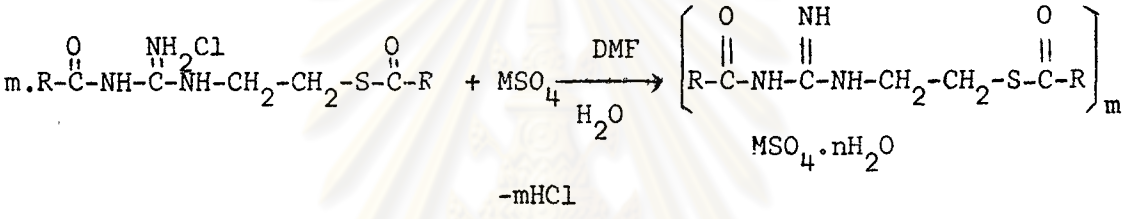
จำนวนโปรตอน	กลุ่ม	δ
1	$-\underline{NH}-\overset{O}{\overset{\|\|}{C}}-$	12.3 - 12.7[1]
1	$-\underline{NH}-CH_2$	9.5 - 10[1]
2	$C=\underline{NH_2}Cl$	8.6 - 9.2[1]
2	$-NH-\underline{CH_2}-$	3.4 - 4.0
2	$-S-\underline{CH_2}-$	2.9 - 3.4
4	$-\overset{O}{\overset{\|\|}{C}}-\underline{CH_2}-$	2.3 - 2.8
4 n	$-\overset{O}{\overset{\|\|}{C}}-CH_2-(\underline{CH_2})_n-CH_3$	1.1 - 1.8
6	$-\overset{O}{\overset{\|\|}{C}}-CH_2-(CH_2)_n-\underline{CH_3}$	0.8 - 1.1[2]
2	$-\underline{CH}=CH_2$	5.6 - 6.0[3]
4	$-CH=\underline{CH_2}$	4.8 - 5.3[3]

[1] จะหายไปเมื่อใส่ D_2O

[2] ไม่พบในสาร เอน,เอล-ได-10-อนุเดคดีโนอิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์(54)

[3] พบในสาร เอน,เอล-ได-10-อนุเดคดีโนอิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (54) เท่านั้น

ดังที่กล่าวมาแล้วในบทนำว่าสารที่จะมีคุณสมบัติป้องกันอันตรายจากรังสีได้ น่าจะเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อนกับโลหะอิออนได้ด้วย ดังนั้นในการศึกษาวิจัยนี้จึงได้ทดลองนำสารอนุพันธ์ เอน, เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์ (41) มาทำปฏิกิริยากับโลหะอิออนคือ แมกนีเซียม, เหล็ก, ทองแดง และสังกะสี โดยนำสารที่สังเคราะห์ได้มาละลายในไดเมธิลฟอร์มาไมด์ (dimethyl formamide) แล้วผสมกับสารละลายของแมกนีเซียมซัลเฟต, เหล็ก (II)ซัลเฟต, ทองแดง (II)ซัลเฟต และสังกะสี (II)ซัลเฟต ในน้ำ พบว่าจะมีตะกอนของสารตัวใหม่ที่เกิดจากการรวมตัวของสารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (40) กับโลหะซัลเฟต ดังแสดงไว้ในสมการที่ 12



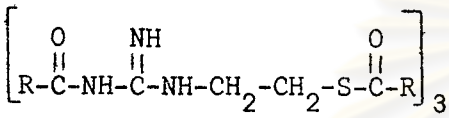
(สมการที่ 12)

m = 3, 4

M = Mg, Fe, Cu, Zn

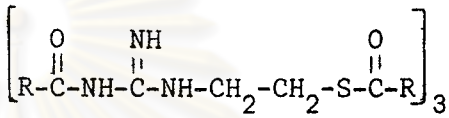
ผลจากการวิเคราะห์หาปริมาณของธาตุที่เป็นองค์ประกอบทำให้ทราบว่า ถ้าโลหะซัลเฟตที่ใช้เป็นแมกนีเซียมซัลเฟต, เหล็ก(II)ซัลเฟต, ทองแดง(II)ซัลเฟต จะใช้สารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (40) 3 โมเลกุล รวมตัวกับโลหะซัลเฟต 1 โมเลกุลคือ สารอนุพันธ์ ทริส [เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน] แมกนีเซียม(II)ซัลเฟต.เอนไฮเดรท {tris[N,S-diacyl-2-mercaptoethylguanidine] magnesium (II) sulphate n hydrate} (56), สารอนุพันธ์ ทริส[เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน] เหล็ก(II)ซัลเฟต เอนไฮเดรท {tris[N,S-diacyl-2-mercaptoethylguanidine] iron(II) sulphate n hydrate} (63) และสารอนุพันธ์ ทริส [เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน] ทองแดง(II)ซัลเฟต เอนไฮเดรท {tris [N,S-diacyl-2-mercaptoethylguanidine] copper (II) sulphate n. hydrate} (70) ตามลำดับ และหากใช้โลหะซัลเฟตเป็นสังกะสี(II)ซัลเฟต จะใช้สาร

อนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (40) 4 โมเลกุล รวมกับสังกะสี (II)ซัลเฟต 1 โมเลกุล คือสารอนุพันธ์ เททราคิส [เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานิดีน] สังกะสี(II)ซัลเฟตเอนไฮเดรท { tetrakis [N,S-diacyl-2-mercapto-ethylguanidine] zinc (II) sulphate n.hydrate } (77) ดังแสดงไว้ในตาราง ที่ 9



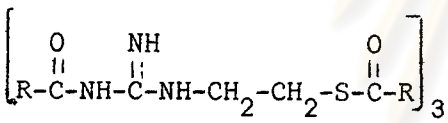
$MgSO_4.nH_2O$

(56)



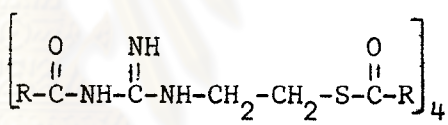
$FeSO_4.nH_2O$

(63)



$CuSO_4.nH_2O$

(70)



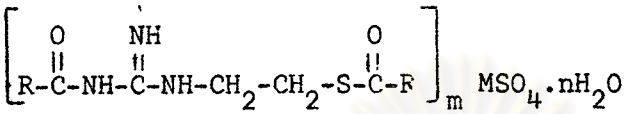
$ZnSO_4.nH_2O$

(77)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 9

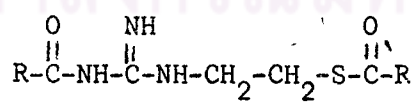
สารประกอบโลหะเชิงซ้อนของสารอนุพันธ์ เอน, เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน(40) กับโลหะซัลเฟต



สารประกอบ	R	M	m	n	จุดหลอมเหลว (°ซ)	ผลการวิเคราะห์หาปริมาณของธาตุที่เป็นองค์ประกอบ					
						C		H		N	
						คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ
57	C_5H_{11}	Mg	3	2	119-120.5	49.03	49.13	8.26	8.54	11.44	11.53
58	C_6H_{13}	Mg	3	2	124-125	51.63	51.50	8.69	8.76	10.63	10.75
59	C_7H_{15}	Mg	3	1	126-127	54.66	54.77	9.03	9.17	10.07	10.67
60	C_8H_{17}	Mg	3	1	126.5-127.5	56.62	56.16	9.36	9.60	9.44	9.62
61	C_9H_{19}	Mg	3	1	126.5-127.5	58.31	58.11	9.65	10.17	8.88	8.88
62	$C_{10}H_{21}$	Mg	3	3	126.5-127.5	58.47	58.05	9.94	9.80	8.18	8.16
64	C_5H_{11}	Fe	3	0	127-129	49.23	49.73	8.39	8.39	11.48	11.49
65	C_6H_{13}	Fe	3	1	127-128	51.04	51.09	8.42	8.63	10.51	10.53
66	C_7H_{15}	Fe	3	0	127-128	54.08	54.15	8.78	9.20	9.96	10.12
67	C_8H_{17}	Fe	3	1	130-131	55.30	55.28	9.15	9.34	9.22	9.28
68	C_9H_{19}	Fe	3	0	126.5-127.5	57.79	57.38	9.42	9.82	8.80	8.90
69	$C_{10}H_{21}$	Fe	3	3	126-127	57.29	56.92	9.74	9.62	8.02	8.13
71	C_5H_{11}	Cu	3	3	118-118.5	46.61	46.79	8.02	8.06	10.87	10.79

ตารางที่ 9 (ต่อ)

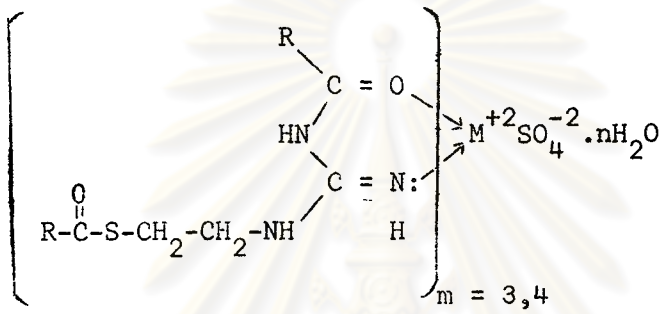
สาร ประกอบ	R	M	m	n	จุดหลอมเหลว (°ซ)	ผลการวิเคราะห์หาปริมาณของธาตุที่เป็นองค์ประกอบ					
						C		H		N	
						คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ	คำนวณ	พบ
72	C_6H_{13}	Cu	3	5	119.5-120.5	47.87	47.66	8.53	8.22	9.85	9.80
73	C_7H_{15}	Cu	3	1	125-125.5	53.30	53.26	8.76	9.03	9.76	9.91
74	C_8H_{17}	Cu	3	1	123.5-124.5	55.00	54.92	9.09	9.46	9.17	9.30
75	C_9H_{19}	Cu	3	1	118-118.5	56.77	56.77	9.39	9.79	8.64	8.65
76	$C_{10}H_{21}$	Cu	3	2	112-123	57.77	57.44	9.68	9.91	8.07	7.39
78	C_5H_{11}	Zn	4	1	120-121	50.02	50.27	8.06	8.52	11.67	11.66
79	C_6H_{13}	Zn	4	1	125-126	52.60	52.24	8.64	9.15	10.83	11.02
80	C_7H_{15}	Zn	4	0	125-126	55.43	55.04	8.99	8.45	10.21	10.79
81	C_8H_{17}	Zn	4	1	126-127	56.77	56.41	9.35	9.80	9.46	9.81
82	C_9H_{19}	Zn	4	1	125.5-126.5	58.49	58.28	9.64	9.44	8.90	9.01
83	$C_{10}H_{21}$	Zn	4	7	125-126	56.94	56.77	9.96	9.50	7.97	8.15



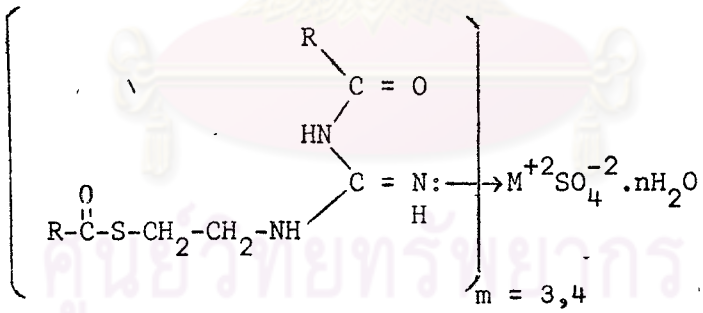
(40)

เมื่อดูจากสูตรโครงสร้างของสารอนุพันธ์ เอน, เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิล-กวานิดีน (40) จะเห็นว่า ภายในโมเลกุลของมันมีอยู่หลายอะตอมที่มีคู่อิเลคตรอนที่ว่าง (lone

pair of electron) ซึ่งสามารถจะเกิดพันธะโคออดิเนท (co-ordinate bond) กับโลหะอิออนได้ และจากผลของการวิเคราะห์หาปริมาณของธาตุที่เป็นองค์ประกอบดังแสดงไว้ในตารางที่ 9 เราจึงอาจจะเขียนสูตรโครงสร้างของสารประกอบโลหะเชิงซ้อนที่ได้ในลักษณะที่เป็นคีเลท (chelate) ดังแสดงไว้ในรูปที่ 14 หรือในลักษณะซึ่งเป็นโซลเวท (solvate) ดังแสดงไว้ในรูปที่ 15



รูปที่ 14 แสดงโครงสร้างของสารประกอบโลหะเชิงซ้อนระหว่างสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (40) กับโลหะซิลเฟตแบบคีเลท

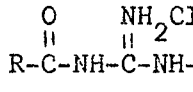


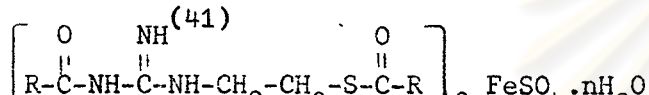
รูปที่ 15 แสดงโครงสร้างของสารประกอบโลหะเชิงซ้อนระหว่างสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (40) กับโลหะซิลเฟตแบบโซลเวท

ซึ่งเราสามารถพิสูจน์สูตรโครงสร้างของสารเหล่านี้ที่จะเป็นแบบใดได้โดยการเปรียบเทียบ IR และ NMR สเปคตร้า กับสารตั้งต้นคือสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีนไฮโดรคลอไรด์ (41) ดังแสดงไว้ในตารางที่ 10 และ 11 ตามลำดับ

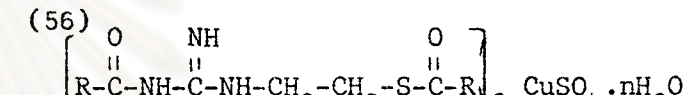
ตารางที่ 10

เปรียบเทียบ IR สเปคตราของสารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์(41) กับสารประกอบโลหะเชิงซ้อนของมัน

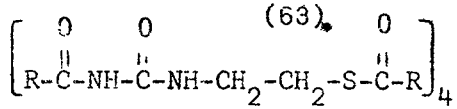




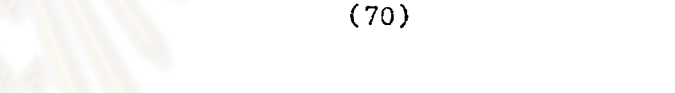
(41)



(56)



(63)



(70)

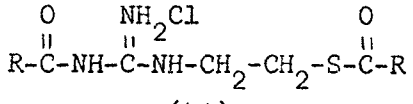
(77)

การยืดหดของพันธะ	กลุ่ม	ν_{max} (ซม$^{-1}$)				
		(41)	(56)	(63)	(70)	(77)
N-H	-NH-C(=NH)-NH-	3050-3350	3050-3330	3100-3350	3080-3320	3050-3320
C = N	-NH-C(=NH)-NH-	1670-1710	1670-1730	1680-1725	1700-1710	1680-1730
C = O	-C(=O)-S-				1670-1680	
C = O	-C(=O)-NH-	1560-1590	1590-1600	1590-1600	1570-1580	1590-1600
		1620-1640	1630-1640	1630-1640	1630-1640	1625-1630
S = O	$SO_4^{=}$	-	1130	1130-1150	1110-1120	1130-1140

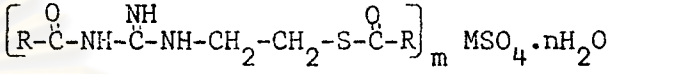
ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 11

เปรียบเทียบ NMR สเปคตร้าของสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์(41) กับสารประกอบโลหะเชิงซ้อนของมัน

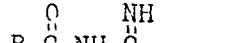
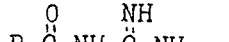
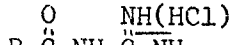
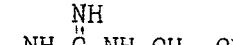
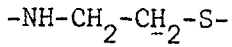
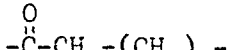
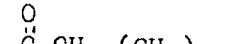


(41)



m = 3 M = Mg (56) m = 3 M = Fe(63)

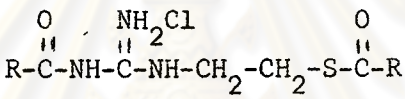
m = 3 M = Cu (70) m = 4 M = Zn (77)

โปรตอน	เคมิคอลชิฟ (δ)				
	(41)	(56)	(63)	(70)	(77)
	12.3 - 12.7*	8.4-10.4*	—	—	9.9-10.6*
	9.5 - 10.0*		—	—	9.2-10.0*
	8.6 - 9.2*		—	—	8.4-9.2*
	3.4 - 4.0	3.4-3.8	3.3-3.8	2.9-3.8	3.3-3.8
	2.9 - 3.4	3.0-3.4	2.9-3.4		2.9-3.3
	2.3 - 2.8	2.4-2.8	2.3-2.9	2.3-2.8	2.3-2.8
	1.1 - 1.8	1.1-1.9	1.1-2.0	1.1-1.8	1.0-2.0
	0.8 - 1.1	0.7-1.1	0.7-1.1	0.7-1.1	0.7-1.1

* หายไปเมื่อหยด D_2O

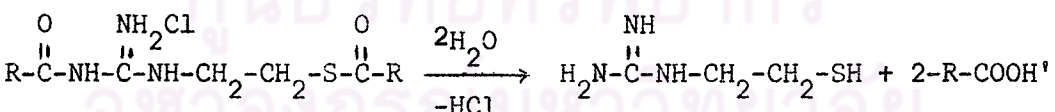
ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หากโครงสร้างของสารประกอบโลหะเชิงซ้อนเป็นแบบคีเลทก็จะต้องมีความแตกต่างกันอย่างเห็นได้ชัดในการเปรียบเทียบ IR และ NMR สเปคตร้าของมันกับสารตั้งต้น แต่ผลจากการเปรียบเทียบดังแสดงไว้ในตารางที่ 10, 11 จะเห็นได้ว่า ยอด (peak) ต่าง ๆ ส่วนใหญ่จะเหมือนกันมีที่แตกต่างกันพอจะเห็นได้เพียงแห่งเดียวเท่านั้นคือ ยอดที่เกิดจากกลุ่ม $-NH-\overset{\overset{NH}{\|}}{C}-NH-$ จึงเชื่อได้ว่า โครงสร้างของสารประกอบโลหะเชิงซ้อนที่ได้ไม่ใช่เป็นแบบคีเลท ดังแสดงไว้ในรูปที่ 14 ซึ่งมีกลุ่มที่เกี่ยวข้องกับพันธะใหม่หลายกลุ่ม แต่จะเป็นแบบโซลเวทดังแสดงไว้ในรูปที่ 15 ซึ่งมีกลุ่มที่เกี่ยวข้องกับพันธะที่เกิดใหม่เพียงกลุ่มเดียวเท่านั้นคือ กลุ่ม $-NH-\overset{\overset{NH}{\|}}{C}-NH-$



(41)

จากสูตรโครงสร้างของสารอนุพันธ์ เอน,เอส-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิล - กวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์ (41) ที่สังเคราะห์ได้ จะเห็นได้ว่ามันมีกลุ่มที่มีความต่างศักย์สูง 2 กลุ่มคือ $-NH-\overset{\overset{O}{\|}}{C}-R$ และ $-S-\overset{\overset{O}{\|}}{C}-R$ ทำให้สามารถเกิดปฏิกิริยารวมตัวกับน้ำและให้ผลเป็น 2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (34) ดังแสดงให้เห็นไว้ในสมการที่ 13



(41) (34) (สมการที่ 13)

ซึ่งสารประกอบ 2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (34) ที่ได้นี้สามารถป้องกันอันตรายจากรังสีได้ดังที่กล่าวมาแล้วในบทนำ และผลจากการศึกษาโดยนำมาทำปฏิกิริยากับโลหะอิออนบางชนิด เช่น แมกนีเซียม, เหล็ก, ทองแดง และสังกะสี พบว่ามันสามารถเกิดสารประกอบเชิงซ้อนแบบโซลเวทกับโลหะอิออนเหล่านั้นได้ แม้ว่าสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดขึ้นจะไม่ได้เป็นแบบ

มีฟันธะโคออดิเนทเหมือนกับสารต้านรังสี 2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน (34) และ 2-เมอแคปโตเอธิลลามีน (7) ดังได้กล่าวมาแล้วในบทนำก็ตาม แต่ก็เป็นเครื่องชี้ให้เห็นว่าสารอนุพันธ์ เอน,เอล-ไดเอซิล-2-เมอแคปโตเอธิลกวานีดีน ไฮโดรคลอไรด์ (41) นี้น่าจะเป็นสารที่มีคุณสมบัติป้องกันอันตรายจากรังสีได้ ซึ่งจะต้องทำการศึกษาต่อไปในอนาคต.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย