MOLECULAR DESIGN OF BENZOXAZINES: AN APPROACH FOR INCLUSION COMPOUNDS

Ms. Ratinan Pacharaprakiti

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University
in Academic Partnership with
The University of Michigan, The University of Oklahoma,
and Case Western Reserve University
2001

ISBN 974-13-0724-1

Thesis Title:	Molecular Design of Benzoxazines: an Approach for Inclusion Compounds
By:	Ms. Ratinan Pacharaprakiti
Program:	Polymer Science
Thesis Advisors:	Asst. Prof. Suwabun Chirachanchai
	Prof. Hatsuo Ishida

Accepted by the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, in partial fulfillment of the requirements for the Degree of Master of Science.

K. Bunyakiat College Director

(Assoc. Prof. Kunchana Bunyakiat)

Thesis Committee:

(Asst. Prof. Suwabun Chirachanchai)

(Prof. Hatsuo Ishida)

(Assoc. Prof. Sujitra Wongkasemjit)

บทคัดย่อ

นางสาวรตินันท์ พัชรประกิติ: การออกแบบเบนซอกซาซีนในระดับโมเลกุล: การไปสู่สารประกอบอินคลูชั่น (Molecular Design of Benzoxazines: an Approach for Inclusion Compounds) อ. ที่ปรึกษา: ผศ. ดร. สุวบุญ จิรชาญชัย และ ศ. ดร. ฮัทสุโอะ อิชิดะ (Prof. Hatsuo Ishida), 42 หน้า ISBN 974-13-0724-1

อนุพันธ์ของเบนซอกซาซีนไดเมอร์ ไดเมอร์ที่มีหมู่เอสเทอร์ และสารประกอบวงแหวนออลิโกเบนซอกซาซีนที่มีความแตกต่างในโครงสร้างที่หมู่วงฟีนอล และหมู่ที่ให้อิเล็คตรอนได้ถูกออกแบบและสังเคราะห์ได้สำเร็จดังที่ได้ตรวจสอบผลวิเคราะห์โครงสร้างด้วยเทคนิค FTIR, ^{1}H-NMR, EA และ MS ปรากฏการณ์อินคลูชั่นศึกษาโดยการจำแนกไอออนด้วยเทคนิคปีเดอร์สัน (Pedersen's technique) ที่ความเข้มข้นของไดเมอร์และโลหะไพเครตกล่าวคือ โซเดียมและโพแทสเซียมเท่ากับ 5.6×10^{-2} และ 7×10^{-5} โมลาร์ (Molar) ตามลำดับ การทดลองให้ผลว่าเบนซอกซาซีนไดเมอร์และไดเมอร์ที่มีหมู่เอสเทอร์สามารถจับไอออนโลหะได้ 43-62% และ 75-94% ตามลำดับ การที่ความสามารถในการจับไอออนแตกต่างกันตามประเภทของเบนซอกซาซีนแสดงให้เห็นถึงอิทธิพลของโครงสร้างร่างแหพันธะไฮโดรเจน และความมีบริเวณที่มีอิเล็คตรอนหนาแน่นในโครงสร้างของเบนซอกซาซีนแต่ละชนิด ในกรณีของสารประกอบวงแหวนออลิโกเบนซอกซาซีนพบว่าไม่มีการจับไอออนโลหะ ซึ่งบ่งถึงขนาดช่องว่างที่ไม่เหมาะสมกับขนาดของไอออนโซเดียมและโพแทสเซียม

ABSTRACT

4272011063: POLYMER SCIENCE PROGRAM
Ratinan Pacharaprakiti: Molecular Design of Benzoxazines: an Approach for Inclusion Compounds.
Thesis Advisors: Asst. Prof. Suwabun Chirachanchai, Prof. Hatsuo Ishida, 42 pp ISBN 974-13-0724-1
Keywords: Benzoxazine Monomer/ Benzoxazine Dimer/ Esterified Dimer/ Cyclic Oligobenzoxazine/ Metal Picrate/ Inclusion Phenomena

A series of benzoxazine dimer, esterified dimer, and cyclic oligobenzoxazine derivatives having different phenol rings and electron donor groups were designed and successfully prepared as structural characterized by FTIR, ^{1}H-NMR, EA, and MS. The inclusion phenomena with metal ions were studied by Pedersen's technique using metal (sodium, and potassium) picrate salts, and the prepared dimers at the concentrations of 5.6×10^{-2} and 7×10^{-5} M, respectively. Benzoxazine dimers showed ion extraction ability at 43-62% while that of esterified dimers at 75-94%. The ion extraction ability depended on the type of benzoxazine dimer implies the effect of hydrogen bonding network and the electron rich area in each benzoxazine dimer structure. For cyclic oligobenzoxazine, unexpectedly, the ion interaction could not be observed which implies that the cavity size was not proper for the sodium and potassium metal ions.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to express deeply gratitude to her Thai advisor, Asst. Prof. Suwabun Chirachanchai who gave intensive suggestions, useful guidances, laboratory skill, and vital help throughout this research work. She also would like to give the great appreciation to her U.S. advisor, Prof. Hatsuo Ishida for recommendation on the research.

She greatly appreciates all Professors and teachers for tendered invaluable knowledge at the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University. She would like to give her appreciation to Assoc. Prof. Sujitra Wongkasemjit for her helps in the use of mass spectroscopy and Dr. Buncha Pulpoka, department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University not only for ^{1}H-NMR measurement, but also his recommendation in ion extraction study. Her great gratitude is extended to thank the National Metal Materials Technology Center (MTEC) for mass spectroscopy (TOF) measurement.

She would like to extend her thanks to Mr. Apirat Laobuthee for intensive guidance and suggestion throughout this work. In addition, she also wishes to express her appreciation to the entire college members, her friends at the Petroleum and Petrochemical for warm support.

Last but not least, the sincerest appreciation is to her family whose love, encouragement, and understanding played the greatest role in her success.

TABLE OF CONTENTS

CHAPTER **PAGE**

CHAPTER **PAGE**

LIST OF SCHEMES

SCHEME **PAGE**

LIST OF FIGURES

FIGURE **PAGE**