

COMPLEXATION OF ALKALI METAL CATIONS BY CALIX[4]ARENE TERTIARY AMIDE DERIVATIVES

KOMPLEKSIRANJE KATIONA ALKALIJSKIH METALA S TERCIJARNIM AMIDNIM DERIVATIMA KALIKS[4]ARENA

Gordan Horvat¹, Leo Frkanec², Vladislav Tomišić¹

¹ Zavod za fizikalnu kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102A, 10000, Zagreb, Hrvatska, ghorvat@chem.pmf.hr

² Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Hrvatska

Priredena su dva derivata kaliks[4]arena s tercijarnim amidnim supstituentima na donjem obodu kaliksarenskog prstena (**1** i **2**). Kompleksacijski afiniteti pripremljenih liganada prema kationima alkalijskih metala proučavani su u acetonitrilu UV spektrometrijskim titracijama te primjenom izotermne mikrokalorimetrije. Određene su konstante stabilnosti odgovarajućih kompleksa, kao i pripadajuće termodinamičke reakcijske veličine. Proučeno je vezanje molekule acetonitrila u hidrofobnu kaliksarensku šupljinu i utjecaj te pojave na reakcije kompleksiranja kationa. Da bi se stekao detaljniji uvid u procese vezanja kationa i molekula otapala s istraživanim spojevima provedene su odgovarajuće računalne simulacije primjenom metode klasične molekulske dinamike.

Sintetizirani kaliksareni jako dobro vežu alkalijske katione u acetonitrilu. Uočeno je da je stabilnost kompleksa s tercijarnim amidnim derivatima kaliks[4]arena znatno veća od one koja odgovara derivatima sa sekundarnim amidnim supstituentima. U odnosu na slobodne ligande, njihovi kompleksi s alkalijskim kationima pokazuju veću sklonost inkluziji molekule otapala uslijed povoljne preorganizacije kaliksarenske *košare*.

