

## Abstract

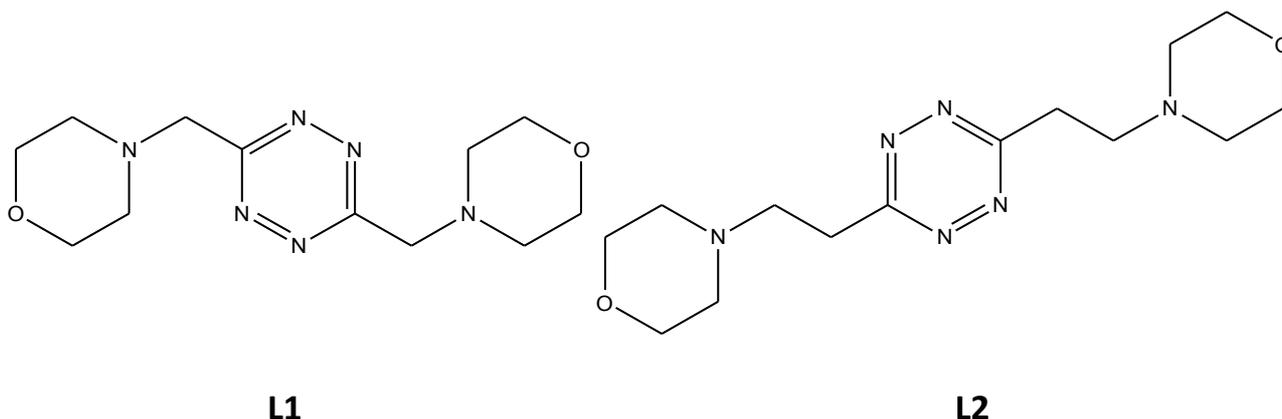
### Studio dell'interazione di anioni organici con due leganti tetrazinici funzionalizzati

### Study of the interaction between organic anions and two functionalized tetrazine ligands

**Candidato:** Cristian morena (cristian.morena@stud.unifi.it)

**Relatore:** Antonio Bianchi (antonio.bianchi@unifi.it)

In questo lavoro di tesi è stata studiata l'interazione dei due leganti tetrazinici L1 e L2 con anioni organici sia alifatici che aromatici. In particolare sono stati studiati anioni carbossilati e solfonati.



I complessi sono stati studiati mediante titolazioni potenziometriche in soluzione acquosa ( $\text{NMe}_4\text{Cl}$  0,1 M, a 298,1 K), per effettuare la speciazione dei sistemi e determinare le costanti di stabilità dei complessi formati, e mediante spettroscopia  $^1\text{HNMR}$  (in  $\text{D}_2\text{O}$  e a pH specifici per le varie specie) per ottenere informazioni strutturali sui complessi in soluzione. Ulteriori informazioni strutturali sono state ottenute mediante la determinazione della struttura cristallina del complesso di  $\text{H}_2\text{L2}^{2+}$  con l'anione benzensulfonato.

I risultati dello studio hanno evidenziato che le specie protonate di entrambi i leganti sono in grado di interagire con gli anioni formando complessi la cui stabilità non è strettamente correlata a interazioni coulombiane carica-carica, mentre rivestono un ruolo importante le interazioni  $\pi$ - $\pi$  stacking e anione- $\pi$ , che possono essere accompagnate da effetto idrofobo. In alcuni casi, a conferma di quanto osservato, l'interazione degli anioni è stata osservata anche con i leganti deprotonati, quindi privi di carica positiva. Nel caso degli anioni benzene-dicarbossilato si è osservato che L1 forma complessi più stabili di L2 e che la posizione relativa dei due gruppi anionici sull'anello aromatico ha una certa influenza sulla stabilità dei complessi.