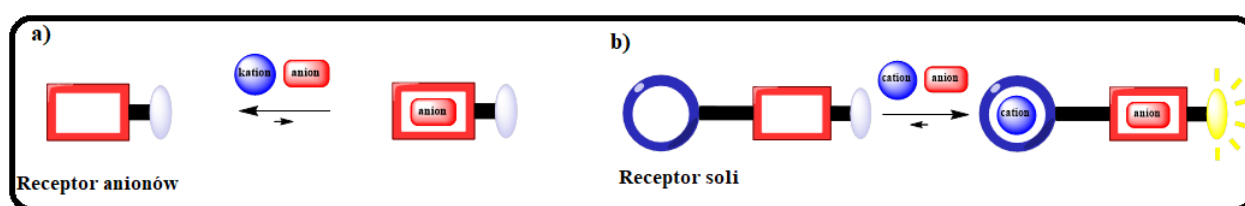


Badanie zdolności kompleksowania receptorów molekularnych z jonami to jeden z głównych nurtów chemii supramolekularnej. W ramach tych badań wykorzystuje się niekowalencyjne oddziaływania i dąży do mocnego i selektywnego wiązania receptorów z jonami. O ile wiedza na temat badań dotyczących kompleksowania kationów jest dobrze ugruntowana, to projektowanie receptorów zdolnych do efektywnego wiązania anionów stanowi wciąż poważny problem. Aniony charakteryzują się różnorodną geometrią oraz bardziej rozmytym ładunkiem niż kationy i dlatego projektowanie receptorów zdolnych do kompleksowania anionów jest dużo trudniejsze. Jeżeli dodamy do charakterystyki anionów ich optyczne właściwości (chiralność) ich enancjoselektywne kompleksowanie staje się jeszcze trudniejsze. W celu rozwiązania wspomnianych problemów projektuje się jednofunkcyjne receptory zdolne do oddziaływania z kationami lub anionami. Do tych badań w laboratorium wykorzystuje się odpowiednie sole posiadające przeciwjony o rozmytym ładunku, które traktuje się jako nie mające wpływu na wiązanie jonów z receptorem (sole tetrabutylamoniowe czy heksafluorofosforanowe). Takie sole nie występują jednak w naturze, natomiast kationy i aniony są na ogół silnie związane z przeciwjonami. Dla takich par jonowych, jednofunkcyjne receptory dedykowane wiązaniu kationów czy anionów są z reguły nieefektywne, ponieważ w wiązaniu z jonem receptor musi współzawodniczyć z przeciwjonem. Rozwiązaniem tego problemu może być projektowanie dwufunkcyjnych receptorów, zdolnych do jednoczesnego wiązania kationów i anionów.



Wiązanie pary jonowej przez a) jedno- i b) dwufunkcyjny receptor.

Niestety, proste połączenie skutecznych receptorów kationów i anionów nie zawsze prowadzi do efektywnych receptorów par jonowych. Bardzo ważne w projektowaniu takich receptorów jest odpowiednie rozmieszczenie domen wiążących. Ich poprawne przyłączenie do platformy receptora może powodować, że kompleksowanie jednego z jonów przez receptor ułatwi wiązanie przeciwjonu (np. przez zmianę konformacji). W szczególności taką właściwość można wykorzystać w przypadku kompleksowania słabo oddziaływujących jonów (Br^- , NO_3^- , ClO_4^-). Wiązanie par jonowych przez receptor może się odbywać na kilka sposobów. Para jonowa może być związana z receptorem i nie mieć bezpośredniego kontaktu ze sobą. Najbardziej pożądaną właściwością receptora jest natomiast wiązanie soli w postaci kontaktowej pary jonowej. W takich sytuacjach dochodzi do bardzo mocnego oddziaływania elektrostatycznego między kationem i anionem, które dodatkowo stabilizują kompleks receptora z solą. Receptorami o takich właściwościach są często makrocykliczne związki otrzymane na drodze połączenia domen zdolnych do wiązania i kationów i anionów. Otrzymanie takich związków jest jednak bardzo trudne, ponieważ reakcje makrocyklizacji charakteryzują się niską wydajnością. Makrocykliczne receptory to zwykle struktury nieposiadające grup funkcyjnych, które wykorzystać można do dalszej modyfikacji. Alternatywą do takich receptorów są acykliczne receptory par jonowych. Poprawne rozmieszczenie domen wiążących w odpowiednio dobranych platformach molekularnych może doprowadzić do skutecznych receptorów soli. Takie receptory są łatwiejsze w syntezie, dalszej modyfikacji mającej na celu wprowadzanie nowych domen wiążących, dodatkowych grup funkcyjnych (ułatwiających badania kompleksotwórcze np. chromofory czy fluorofory), czy wbudowaniu receptorów w sieci polimerowe. Celem tego projektu jest synteza rodziny nowych receptorów par jonowych, pochodnych amidu kwasu kwadratowego charakteryzujących się modułową budową. Ta właściwość pozwoli na relatywnie prostą syntezę biblioteki receptorów o zmiennych elementach strukturalnych, mianowicie odpowiednio przygotowanych modułach zawierających domeny wiążące jak i modułach zawierających reportery, informujące o procesie kompleksowania. Systematyczne modyfikacje w obrębie domen wiążących oraz reporterów w tak zaproponowanych receptorach powinny pozwolić mi na wyznaczenie korelacji pomiędzy budową receptora a jego zdolnością do oddziaływania z solami. Korzystając z tej metody zamierzam również modyfikować wybrane nośniki i tym sposobem otrzymać funkcjonalne materiały zawierające jednostki receptora. Tego typu związki zostaną wykorzystane w badaniach transportu soli przez membrany oraz badaniach ekstrakcyjnych, ze szczególnym uwzględnieniem usuwania z wody szkodliwych soli.