

**ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΗ ΚΑΙ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΣΥΜΠΛΟΚΟΥ ΕΓΚΛΕΙΣΜΟΥ ΤΗΣ
ΦΑΙΝΟΛΟΦΘΑΛΕΪΝΗΣ ΜΕ ΤΗΝ Β-ΚΥΚΛΟΔΕΞΤΡΙΝΗ: Η ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΩΝ ΑΛΚΑΛΙΚΩΝ ΑΛΑΤΩΝ
ΙΩΔΙΟΥ ΣΤΗΝ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΓΚΛΕΙΣΜΟΥ**

Κ. Κουδέρης¹, Σ. Τσιγκόιας¹, Π. Σιαφαρίκα¹, Σ. Καζιάννης², Α. Γ. Καλαμπούνιας^{1,3}

¹Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, GR-45110 Ιωάννινα, Ελλάδα

²Εργαστήριο Ατομικής Μοριακής, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, GR-45110 Ιωάννινα, Ελλάδα

³ Πανεπιστημιακό Ερευνητικό Κέντρο (Π.Ε.Κ), Ινστιτούτο Επιστήμης Υλικών και Υπολογισμών, Ιωάννινα, Ελλάδα

*akalamp@uoi.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο σχηματισμός του συμπλόκου εγκλεισμού μεταξύ της β-κυκλοδεξτρίνης (CD) και της φαινολοφθαλεΐνης (PP) μελετήθηκε με την φασματοσκοπία IR και UV-Vis υπό τη παρουσία αλκαλικών αλάτων. Έγινε μία προσπάθεια να κατανοήσουμε την επίδραση των αλάτων του LiI, NaI, KI και CsI στη σταθερά συμπλοκοποίησης, αλλά και στις θερμοδυναμικές παραμέτρους που σχετίζονται με τη συμπλοκοποίηση. Η ενθαλπία της ενθυλάκωσης βρέθηκε αρνητική, τόσο κατά την απουσία των αλάτων, όσο και κατά την παρουσία τους. Η απόλυτη τιμή της διαφοράς της ενθαλπίας βρέθηκε να είναι μεγαλύτερη απουσία των αλάτων, ενώ οι μεγαλύτερες διαφορές παρατηρήθηκαν κατά σειρά στα άλατα των Na, K, Cs και Li με το τελευταίο να δείχνει και τη μεγαλύτερη διαφοροποίηση. Επίσης, παρατηρήθηκε ότι όσο αυξανόταν η συγκέντρωση των αλάτων, η διαφορά ενθαλπίας μειωνόταν μονότονα. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ της β-κυκλοδεξτρίνης και της φαινολοφθαλεΐνης αποδίδονται κυρίως σε σχηματισμό δεσμών υδρογόνου μεταξύ των δύο μορίων, αλλά και σε αλληλεπιδράσεις μέσω δυνάμεων Van der Waal's. Επιπλέον, κατά την προσθήκη LiI, οι ηλεκτροστατικές δυνάμεις διαδραμάτισαν σημαντικό ρόλο [1, 2]. Τα φάσματα IR της φαινολοφθαλεΐνης, της β-κυκλοδεξτρίνης, αλλά και του συμπλόκου που σχηματίζουν μελετήθηκαν καθώς και οι αλλαγές μεταξύ τους, αποδόθηκαν στο μηχανισμό της συμπλοκοποίησης. Εκτός των πειραματικών τεχνικών IR και UV-Vis, η συμπλοκοποίηση μελετήθηκε και μέσω ημιεμπειρικών και DFT μεθόδων [3]. Επιπρόσθετα, στην εργασία αυτή μελετήθηκε η μοριακή πρόσδεση της φαινολοφθαλεΐνης στην κυκλοδεξτρίνη με τεχνικές μοριακής δυναμικής. Τα θεωρητικά αποτελέσματα βρέθηκαν σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: β-Κυκλοδεξτρίνη, Σύμπλοκο εγκλεισμού, UV-Vis, FT-IR, Θεωρητικοί υπολογισμοί.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Contributions of weak interactions to the inclusion complexation of 3-hydroxynaphthalene-2-carboxylic acid and its analogues with cyclodextrins. Zheng-Ping Yi, Hui-Lan Chen, Zheng-Zi Huang, Qing Huang, Jun-Shen Yu. 2000. Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2, Issue 12, Page 2359 to 2050
- [2] b-Cyclodextrin Complexes of Different Type with Inorganic Compounds. A. Buvdri And L. Barcza. 1979. Inorganica Chimica Acta, Volume 33, Pages L179 – L180
- [3] Theoretical study on β-cyclodextrin inclusion complexes with propiconazole and protonated propiconazole. 2021. Adrian Fifere¹, Narcisa Marangoci, Stelian Maier, Adina Coroaba, Dan Maftai and Mariana Pintea. Beilsen. Journal of organic chemistry, 8, Pages 2191 – 2201