

Meghatározzuk az általam előállított 1-7 koronatercek, valamint a 9 és 10 difenilfoszfiniszv származékok pK_a értéket UV-pH titrálásos, illetve a 8 vegyület esetén potenciometrikus módszerrel. Az eredményeket az 1. táblázatban foglaltam össze, feltüntetve a számítógépes prediktor szoftverrel előzetesen számított eredményeket is.

1. táblázat pK_a értékek

Vegyület	pK _a érték	
	Számított	Méti
1	2,46	3,02
2	2,68	3,21
3	2,20	5,37
4	2,15	1,54
5	1,90	1,48
6	1,72	4,22
7	1,58	3,45
	2,18	1,84
8	8,89	10,40
	9,56	12,77
9	2,30	2,68
10	1,32	0,24

Az aromás gyűrűn lévő szubsztituensek hatását vizsgálva az 1, 2, 4 és 5 koronatercek viselkedésétől megállapítható, hogy a várakoznak megfelelően alakultak. Az elektronvezető nitrocsoporthoz növeltek a koronater savasságát, míg az elektronvívó *tert*-butilcsoporthoz csökkentették azt. Azonban a 3, 6, és 7, a koronagyűrűhöz viszonyítva az aromás gyűrűkön *ortho* helyzetben nitrocsoporthoz tartalmazó makrociklusok savassága kisebbnek adódott az 1 alapvegyületénél, a várakoztól eltérően. Ez a jelenség a 10 nitrocsoporthoz tartalmazó difenilfoszfiniszv-származék esetében nem figyelhető meg, tehát kijelenthető, hogy az eltérést a koronagyűrű jelenléte okozza, valamint a konformációs hatás, illetve másodrendű kölcsönhatások kialakulása keresztül. Ezt a későbbiekben kvantitatíven számításokkal kívánjuk részletesebben vizsgálni.

[1] R. M. Izatt, R. L. Bruening, P. Huezilly, C.W. McDaniel, J.S. Bradshaw, J.J. Christensen, *Analytical Chemistry*, **1988** (60) 1694-1699.
 [2] R. A. Bartsch, *ACS Symposium Series*, **1999** (716) 146-155.
 [3] M. Uliaszcz, W. Walkowiak, Y. Jung, J.S. Kim, R.A. Bartsch, *Analytical Chemistry*, **2003** (75) 2276-2279.
 [4] T. Szabo, E. Hirsch, T. Tóth, P. Huezilly, *Tetrahedron*, **2014** (70) 1443-1449.
 [5] B. Dhanan, D. Redmore, *Journal of Organic Chemistry*, **1986** (51) 179-183.
 [6] P. Huezilly, E. Samu, B. Verne, G. Mezey-Vandor, M. Nögrádi, J.S. Bradshaw, R.M. Izatt, *Tetrahedron*, **1999** (55) 1491-1504.