

## VII. Závěr

V této diplomové práci byly studovány tetrafosforové ligandy a jejich komplexy, zejména pak s  $\text{Ln}^{3+}$  kationty, které by neměly vázat molekulu vody v první koordinační sféře. Tyto sloučeniny byly dále charakterizovány řadou metod za účelem získání více informací o jejich vlastnostech. Již dříve byla na europitých komplexech těchto ligandů luminiscenční spektroskopií potvrzena absence přímo koordinované vody. Tento fakt byl rovněž potvrzen i u rentgenových struktur komplexů  $\text{Gd-DOTP}^{\text{H}}$  a  $\text{Gd-DOTP}^{\text{OEt}}$ . Koordinovaná molekula vody byla nalezena pouze v případě komplexů  $\text{Ce-DOTP}^{\text{H}}$  a  $\text{Ce-DOTP}^{\text{OEt}}$ , a to měřením  $^{17}\text{O}$  lanthanoidy indukovaných posunů. Měření  $^{31}\text{P}$  NMR spekter odhalilo pozoruhodnou odlišnost mezi komplexy  $\text{Ln-DOTP}^{\text{H}}$  a  $\text{Ln-DOTP}^{\text{OEt}}$  oproti  $\text{Ln-DOTP}^{\text{hm}}$  a to v počtu jejich izomerů v roztoku. Zatímco u dříve jmenovaných byla nalezena směs mnoha izomerů, v případě komplexů  $\text{Ln-DOTP}^{\text{hm}}$  se v roztoku setkáváme pouze s izomery dvěma, u kterých ještě výrazně převažuje zcela symetrický izomer  $RRRR$  ( $SSSS$ ). Z relaxometrického hlediska vykazují pak všechny studované systémy velice podobné vlastnosti. Za účelem získání více informací z tohoto směru byla provedena úplná relaxometrická studie na gadolinitých komplexech studovaných ligandů. Naneštěstí se však ukázala být  $^{17}\text{O}$  data ( $T_1$ ,  $T_2$  a  $\omega$ ) poněkud nezajímavá, právě z důvodu absence molekuly vody ve vnitřní koordinační sféře. Byl proveden i pokus o jejich simultánní matematické zpracování s  $^1\text{H}$  NMRD profily dle klasického BSM modelu. Smysluplnější se ale nakonec jevílo simultánní zpracování pouze  $^1\text{H}$  NMRD profilů spolu s EPR daty, pro které byla použita sada rovnic vytvořených speciálně pro molekuly, u nichž se uvažuje pouze vliv druhé a vnější hydratační sféry. Z nich byly získány jednak elektronické parametry,  $\Delta^2$  a  $\tau_v$  a dále také počet molekul v druhé koordinační sféře,  $q^{\text{SS}}$ . Z  $^{31}\text{P}$  relaxometrických dat byly rovněž spočteny vzdálenosti  $\text{Ln-P}$  v komplexech lanthanoidů, které jsou ve velice dobré shodě s daty získanými z rentgenové strukturní analýzy.

Stručně řečeno, navzdory tomu, že tyto systémy vykazují tak podobné relaxometrické vlastnosti, liší se rozhodně ve struktuře komplexů v roztoku. To může být dáno právě různým vlivem vodíkových vazeb, vyskytujících se v těchto ligandech a komplexech. Podle všeho je ale zřejmé, že bude v případě těchto sloučenin nutné ještě jejich další zkoumání a to v mnoha směrech.

## VIII. Literatura

- [1] Greenwood, N. N.; Earnshaw, A. *Chemie prvků* Informatorium, Praha **1993**
- [2] Lindoy, L. F. *Chemistry of Macrocyclic Ligand Complexes*, Cambridge University Press, Cambridge **1989**
- [3] Příklady crownetherů viz. internetová stránka:  
[http://www.vscht.cz/uoch/Skupiny/Lhotak/my\\_webs/\\_private/crownethery.htm](http://www.vscht.cz/uoch/Skupiny/Lhotak/my_webs/_private/crownethery.htm)
- [4] Teorie potenciometrických titrací viz. internetová stránka:  
<http://www.ft.utb.cz/people/koutny/analchem/bodekv.doc>
- [5] Teorie k rentgenové difrakci a měření struktury krystalů viz. internetová stránka:  
<http://www.xray.cz/krystalografie>
- [6] Teorie k EPR spektroskopii viz. internetová stránka:  
<http://cheminfo.chemi.muni.cz/ianua/epr/index.htm>
- [7] Teorie k NMR spektroskopii viz. internetová stránka VŠCHT Praha:  
<http://www.vscht.cz/nmr/predmet/lekce/NMR-lekce1.pdf>
- [8] Peters, J. A.; et al. *Progress in NMR Spectroscopy* **1996**, 28, 283
- [9] Winter, P. M.; et al. *J. Appl. Physiol.* **1998**, 85, 1806
- [10] Seshan, V.; et al. *Magn. Reson. Med.* **1995**, 34, 25
- [11] Aime, S.; et al. *Chem. Commun.* **1996**, 1265
- [12] Merbach, A. E.; Tóth, É. *The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging*, John Wiley & Sons, New York **2001**
- [13] Šedinová, M. *Bakalářská práce* **2005**
- [14] Botta, M. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2000**, 399
- [15] Lauffer, R. B. *Chem. Rev.* **1987**, 87, 901
- [16] Informace o radiomedicíně lze nalézt na internetové stránce:  
<http://www.sweb.cz/AstroNuklFyzika/JadRadMetody.htm>
- [17] Bazakas, K.; Lukeš, I. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1995**, 1133
- [18] Cole, E; et al. *Synthesis* **1992**, 63
- [19] Geraldes, C. F. G. C.; et al. *Magn. Reson. Med.* **1993**, 30, 696
- [20] Rohovec, J.; et al. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2000**, 195
- [21] Lubal, P.; et al. *Polyhedron* **2001**, 20, 47