

Abstrakt

Disertační práce je zaměřena na syntézu a studium manganatých komplexů jako alternativy ke komplexům gadolinitým, což jsou široce využívané kontrastní látky pro tomografii magnetické rezonance (Magnetic Resonance Imaging, MRI). V rámci nalezení vhodných manganatých komplexů jako potenciálních kontrastních látek pro MRI byly zkoumány tři strukturně rozdílné skupiny pentadentátních ligandů lišících se velikostí makrocyclické kavity, druhem donorových atomů a počtem pendantních ramen obsahující různé funkční skupiny. Z krystalových struktur bylo zjištěno, že Mn^{2+} iont má v těchto komplexech koordinační číslo 6 nebo 7, což umožňuje koordinaci jedné nebo dvou molekul vody. Přímá koordinace molekuly vody ovšem snižuje celkovou stabilitu komplexu a proto je termodynamická stability studovaných komplexů nižší než pro komplexy s polyaminokarboxyláty a stejně tak jejich disociace je mnohem rychlejší v porovnání s $[Mn(nota)]$ nebo $[Mn(dota)]^{2-}$. Všechny studované manganaté komplexy jsou stálé vůči oxidaci vzdušným kyslíkem s výjimkou dvou komplexů s 12-člennými makrocykly, které jako jediné podléhají oxidaci za vzniku manganitých komplexů. Hodnoty relaxivity komplexů se dvěma koordinovanými molekulami vody jsou přibližně dvakrát vyšší než pro komplexy s jednou molekulou vody a zároveň jsou srovnatelné s relaxivitou komerčních kontrastních látek založených na gadolinitých komplexech. ^{17}O NMR měření při různých teplotách ukázalo, že rychlost výměny vody na zkoumaných komplexech je závislá na druhu ligandu – od velice pomalé, přes střední až po extrémně rychlou. Z výsledků ^{17}O NMR měření při vysokém tlaku byl potvrzen mechanismus výměny koordinované vody, který je disociativní pro komplexy s koordinačním číslem 7 a asociativní pro komplexy s koordinačním číslem 6. Malé bidentátní anionty přítomné v plazmě (fosfát, citrát) jsou schopny substituovat pouze jednu ze dvou koordinovaných molekul vody v komplexu s 15-členným pentaaza-makrocyklem (L^2), zatímco v ostatních případech nemá přítomnost těchto aniontů na komplex žádný vliv nebo dochází k pozvolnému rozkladu.

Klíčová slova:

manganaté komplexy, polyaza makrocykly, pyridinové makrocykly, krystalové struktury, konstanty stability, disociační kinetika, relaxometrie, vysokotlaké ^{17}O NMR, NMRD, výměna vody, Magnetic Resonance Imaging.