

Abstrakt

Předkládaná disertační práce se týká aniontových receptorů založených na symetricky tetrasubstituovaných kalix[4]arenech v *cone* konformaci. Tyto receptory lze snadno připravit, jsou rozpustné ve vodě a použitelné pro rozpoznávání tetraedrických oxoaniontů.

Práce začíná krátkým přehledem literatury z oblasti aniontových receptorů a sensorů založených na kalix[4]arenech. Teoretická část práce se zabývá stereochemickou studií struktur kalix[4]arenů z Cambridgeské strukturní databáze (CSD). Důraz je kladen na vliv inter- a/nebo intramolekulárních interakcí na geometrii a rigiditu kalix[4]arenového skeletu. Pro popis geometrie kalix[4]arenového skeletu bylo nutno zavést nové parametry α , β a δ , které výstižně popisují geometrii základního skeletu kalix[4]arenů. Tato stereochemická studie sloužila jako základ pro návrh potencionálních aniontových receptorů založených na symetricky tetrasubstituovaných kalix[4]arenech v *cone* konformaci.

Experimentální část disertační práce popisuje syntézu symetricky tetrasubstituovaných kalix[4]arenů obsahujících 1-propoxy skupiny na dolním kruhu a syntézu kalix[4]arenů s karboxymethoxy skupinami na dolním kruhu, u kterých je možno očekávat lepší rozpustnost ve vodě. Identita a čistota připravených látek byla potvrzena ^1H a ^{13}C NMR, ESI MS, FTIR, FT Raman, pomocí bodu tání a TLC. Byly rovněž určeny krystalové struktury několika připravených kalix[4]arenů. U těchto struktur byla diskutována stereochemie základního kalix[4]arenového skeletu, která odpovídala trendům pozorovaným u struktur kalix[4]arenů známých z CSD.

Dále bylo provedeno měření interakcí připravených kalix[4]arenů s anionty, zejména tetraedrickými oxoanionty ve formě tetrabutylamoniových solí. Interakce byly studovány pomocí UV-Vis spektroskopie v acetonitrilu, dimethylsulfoxidu a vodných roztocích HCl. Měření ve vodných roztocích bylo komplikováno zejména agregací způsobenou hydrofobními a π - π interakcemi, která byla pozorovatelná v koncentraci vyšší nebo rovné 10^{-4} M. Byly počítány stechiometrie a interakční konstanty; pro jeden z připravených kalix[4]arenů byla zjištěna interakční konstanta $1770 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$ pro 1:1 stechiometrii se síranovým aniontem v $5 \cdot 10^{-3}$ M vodném roztoku HCl.