

Některé typy porfyrinů mohou být použity jako achirální detektory při určování enantiomerního přebytku chirální látky. Porfyriny mohou tvořit komplex s chirálními organickými molekulami, které indukují neekvivalenci některých protonů v původně symetrickém porfyrinu. To má za následek rozštěpení příslušných signálů v NMR spektru, které závisí lineárně na enantiomerním přebytku chirální molekuly. V této práci jsme zkoumali komplex di-brombenzylovaného oxoporfyrinu s chirální kafsulfonovou kyselinou. Z NMR titrace byla určena asociační konstanta $K \approx 5 \times 10^4$ l/mol a stechiometrie komplexu 1:1. Potvrdili jsme lineární závislost rozštěpení signálu β -protonu porfyrinu na enantiomerním přebytku. Nízkoteplotní měření prokázala existenci dvou různých konformací komplexu v přibližném poměru 0.7:0.3 (při -60 °C). Kvantově-mechanické výpočty metodou DFT za použití BLYP/3-21G* ukázaly rovněž dvě konformace v zastoupení 0.79:0.21. Metodou GIAO/PBE1PBE/6-31G(2df,2pd) byly vypočteny chemické posuny vypočtených struktur a porovnány s experimentálními hodnotami.