

Abstrakt

Během práce byla studována pH závislost koordinačních módů lanthanoidových komplexů s makrocyclickými ligandy založenými na skeletu 1,4,7,10-tetraazacyklododekanu se třemi acetátovými a jednou aminoethylovou skupinou s *N*-alkyl-*N*-methylfosfonátovým substituentem, DO3AN(R)P, kde R je alkylový substituent na atomu dusíku aminoethylového pendantního ramene (R = methyl, benzyl).

Komplexy lanthanoidů dříve studovaného prototypového ligandu DO3ANP se sekundární aminoskupinou (R = H) vykazaly díky různým koordinačním možnostem zajímavé vlastnosti z hlediska ^{31}P NMR zobrazování, umožňující *in situ* měření pH. Dané komplexy jsou použitelné i z hlediska sledování kinetiky chemické výměny protonu aminové skupiny v ^1H NMR zobrazování pomocí přenosu saturace při chemické výměně (chemical exchange saturation transfer, CEST NMR). V rámci této práce byly pro lepší porozumění změny koordinačních módů této třídy ligandů připraveny nové deriváty DO3ANMeP a DO3ANBnP a bylo studováno jejich koordinační chování vůči vybraným iontům lanthanoidů (Eu^{3+} , Gd^{3+} , Dy^{3+} , Yb^{3+}).

Na základě NMR a luminiscenčních experimentů bylo zjištěno, že v kyselém prostředí dochází u komplexů s DO3ANP ke koordinaci molekuly vody, která je v bazickém prostředí vytlačena změnou koordinace pendantního ramena, která je ve ^{31}P NMR spektru doprovázena významnou změnou chemického posunu. Pro deriváty s terciárním aminem na pendantním rameni nebyl tento jev pozorován nikde na škále pH mezi 2 a 10.

Druhotným úkolem této práce byla optimalizace obecné syntézy ligandů DO3AN(R)P zavedením vhodně substituované aminoethylové skupiny do skeletu 1,4,7,10-tetraazacyklododekan-1,4,7-trioctové kyseliny (DO3A). Zvláštní pozornost byla věnována derivátu nesoucímu 2,2,2-trifluorethylovou skupinu, který by byl potenciálně použitelný i pro zobrazování pomocí ^{19}F NMR. Byly testovány různé metody zavádění trifluorethylové skupiny. Zvolený syntetický prekurzor byl připraven redukcí příslušného trifluoracetamidu – byly testovány různé podmínky redukce pomocí LiAlH_4 a BH_3 (včetně různých typů generování BH_3 *in situ*).