

Za přítomnosti chirálního činidla, může být NMR použita jako metoda pro určení enantiomerního nadbytku u chirálních molekul. V této práci jsme se za pomoci ^1H -NMR spektroskopie zabývali detekcí enantiomerního nadbytku Ibuprofenu (guest) použitím nechirálního porfyrinógenu DiBrBzOxP (host). Detekce enantiomerního nadbytku probíhala zásluhou tvorby host-guest komplexu, kde host sloužil jako detektor. Tvorba komplexu se projevuje rozštěpením NMR signálu pyrrolových protonů DiBrBzOxP a to lineárně s enantiomerním přebytkem Ibuprofenu. Měření taktéž ukázali, že voda se chová jako inhibitor pro tvorbu komplexu. Započtením její inhibice byla pomocí titrace určena asociační konstanta komplexu $K_a = 6.02\text{mol}/l^{-1}$. Pro popsání vazebného mechanismu komplexu, byly provedeny výpočty pomocí metody funkcionálu hustoty. Komplex byl nejprve podroben geometrické optimalizaci pomocí funkcionálu M06-L/6-31G(d,p). Pro finální struktury byli za pomoci GIAO/M06-L/6-31++G(d,p) vypočteny NMR chemické posuvy, které se následně porovnali s experimentálními hodnotami. Singulární dekompozice UV/vis a Ramanovských spekter titrovaných kyselinou trifluoroctovou odhalila existenci troch různě protonovaných forem DiBrBzOxP.