

ABSTRAKT

Studium komplexů lanthanoidů pomocí spektroskopických metod

Monika Krupová

(Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze)

Konvenční strukturní analýza nabízí pouze omezené možnosti k určení absolutní konfigurace chirálních látek. Jednou z možností je použití komplexů lanthanoidů s tris-(β -diketonátovými) ligandy. Tyto komplexy jsou elektricky neutrální a v organických rozpouštědlech mohou tvořit jiné komplexy s různými malými organickými molekulami, např. s chirálními alkoholy a aminoalkoholy. Díky této interakci je pak možné chiroptickými metodami určit konfiguraci chirální látky.

Abychom interakci organická látka-Ln komplex lépe porozuměli, studovali jsme interakci komplexu Eu(FOD) s (*R*)- a (*S*)- enantiomerem 1-fenylethanolu (PE) v n-hexanu pomocí IR spektroskopie, Ramanovy spektroskopie, Ramanovy optické aktivity (ROA), UV-Vis absorpce a UV cirkulárního dichroismu (UVCD). Jenom ROA a UVCD spektra byly dostatečně citlivé pro studium komplexace zkoumaných systémů. S jejich pomocí se podařilo přibližně určit poměr kov/ligand v komplexu a vazebnou konstantu.

V předchozích experimentech bylo pozorováno stonásobné zvětšení ROA signálu, např. alkoholu v komplexu, oproti volné chirální látce. Je to částečně dáno rezonancí excitačního laserového záření s elektronickými přechody Eu^{3+} iontu. Díky tomu je možné výrazně snížit čas a zmenšit potřebnou koncentraci při změření ROA spektra. Data získaná pomocí Ramanovy optické aktivity byly podpořeny naměřením UVCD spekter. Komplex Eu(FOD) a PE indukoval přibližně symetrický UVCD signál v okolí 300 nm.

Domníváme se, že cíleným výběrem ligandů navázaných na Eu^{3+} iont by v budoucnu bylo možné zvýšit afinitu nebo selektivitu komplexů vůči různým chirálním substrátům. Zejména teoretické modelování by umožnilo lépe pochopit povahu interakce mezi Eu^{3+} komplexem a chirální molekulou, a vysvětlit mechanismus rezonančního ROA.

Klíčová slova: komplexy lanthanoidů, europium, Ramanova optická aktivita, rezonance, cirkulární dichroismus, kvantová mechanika, chiralita, molekulová struktura.