

## Abstrakt:

Oxoporfyrinogeny, ploché makrocyclické molekuly, na sebe dokáží navázat kyseliny či jiné látky a zároveň pohlcují světlo ve viditelném oboru. Tyto vlastnosti jsou předpokladem pro molekulární kolorimetrický senzor, detekující přítomnost konkrétních látek ve vzorku. V této práci jsme studovali chromismus tří oxoporfyrinogenů, **OxP** a jeho částečně (**Bz<sub>2</sub>OxP**) a úplně (**Bz<sub>4</sub>OxP**) N-benzylovaných derivátů. Jejich kolorimetrická odezva na organické kyseliny je způsobena protonací a následnou tvorbou supramolekulárního „host-guest“ komplexu. Vysoká citlivost **OxP** na přítomnost kyseliny se postupně snižuje u **Bz<sub>2</sub>OxP** a **Bz<sub>4</sub>OxP**, neboť N-benzylace blokuje centrální vazebná místa a tím se snižuje vazebná afinita oxoporfyrinogenů. Kromě toho byla pozorována solvatochromická odezva oxoporfyrinogenů na měnící se polaritu rozpouštědla, kde se ukázala podobně snížená citlivost u **Bz<sub>2</sub>OxP** a **Bz<sub>4</sub>OxP**. Ke studiu chromismu a vazebných vlastností byly použity UV/vis a NMR spektroskopie, tvorba komplexů oxoporfyrinogen-kyselina byla popsána vazebnými modely typu „host-guest“.

Přítomnost chemické výměny v NMR spektrech protonovaného **OxP** a **Bz<sub>2</sub>OxP** ukázala na přítomnost několika dynamických procesů, mimo jiné prototropní tautomerizace (tj. změna místa protonace) nebo rotace objemných postranních skupin v **Bz<sub>2</sub>OxP**. Tyto procesy byly v NMR pozorovány při různých teplotách a koncentracích kyseliny, příslušné rychlostní koeficienty jsme získali fitováním spektrálních čar. Vliv teploty byl u protonovaného **Bz<sub>2</sub>OxP** popsán Eyringovou rovnicí, vliv koncentrace kyseliny jsme modelovali pomocí kinetických rovnic odvozených z kompetitivní vazby typu „host-guest“.

Tato práce podrobně popisuje mechanismus barevných změn u **OxP**, **Bz<sub>2</sub>OxP** a **Bz<sub>4</sub>OxP** a potvrzuje jejich případné využití jako kolorimetrických senzorů v nepolárních rozpouštědlech. Náš popis dynamických procesů pomocí NMR přispívá k pochopení koncentrační závislosti rychlostních koeficientů, která je vždy specifická pro daný systém. Použité modely lze aplikovat na širokou škálu dynamických systémů.