

ABSTRAKT

Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra: **Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv**

Kandidát: **Mgr. Antonín Cidlina**

Školitel: **doc. PharmDr. Petr Zimčík, Ph.D.**

Konzultant: **doc. PharmDr. Veronika Nováková, Ph.D.**

Název práce: **Vliv strukturních aspektů na fotofyzikální vlastnosti
ftalocyaninů**

Ftalocyaniny (Pc) a jejich azaanalogy tetrapyrazinoporfyriziny (TPyzPz) jsou makrocyclické planární látky s 18 delokalizovanými π -elektrony. Právě kvůli tomuto rozsáhlému systému dvojných vazeb vynikají svými absorpčními, fotofyzikálními i elektrochemickými parametry, pro které jsou hojně využívány v různých aplikacích (např. fotodynamická terapie, katalyzátory, tekuté krystaly, solární články). Pro každou aplikaci je však zapotřebí jiných vlastností molekuly, které lze významně ovlivnit periferní substitucí a typem centrálního kationtu kovu.

První část disertační práce je vyvrcholením rozsáhlé systematické studie zkoumání vlivu strukturních faktorů na účinnost intramolekulárního přenosu náboje (ICT) u TPyzPz, který je zodpovědný za výrazné snížení fotofyzikálních parametrů a to kvantového výtěžku singletového kyslíku (Φ_{Δ}) a fluorescence (Φ_F). Nejprve jsme se zaměřili na vliv periferních substituentů na efektivitu ICT. Byla připravena série látek s periferními substituenty s různými elektronovými efekty, které byly vybrány na základě hodnot Hammettovy konstanty σ_p pro konkrétní či strukturně blízké substituenty. Bylo pozorováno, že efektivita ICT významně roste s rostoucí elektronegativitou substituentu. Zároveň bylo zjištěno, že povaha substituentu významně ovlivňuje i acidobazické vlastnosti azomethinových atomů dusíku a že jejich protonizace vede k poklesu hodnot fotofyzikálních parametrů takřka k nule. Tohoto poznatku jsme využili v další studii, která popisuje vliv délky spojovacího konjugovaného řetězce mezi donorovou (*N,N*-dimethylamino skupina) a akceptorovou částí molekuly (makrocycklus). Závěrem této studie bylo, že účinnost ICT u TPyzPz klesá s rostoucí vzdáleností akceptoru od donoru. Také jsme zde navrhli pH senzory pro úzkou oblast pH s unikátním mechanismem

přepínání na základě dvou na sobě nezávislých zhášecích principů a to jak v organickém rozpouštědle (THF), tak i ve vodném prostředí po jejich zakotvení do lipozomů.

Druhá část disertační práce se zabývá strukturními vlivy na absorpční a fotofyzikální vlastnosti neperiferně substituovaných Pc. U látky substituované stericky objemnými *tert*-butylsulfanylovými substituenty byl pozorován výrazný hypsochromní posun Q-pásu v porovnání s méně objemnými neperiferně substituovanými Pc, což se vymyká dříve publikovaným faktům. Zároveň bylo zjištěno, že elektronový efekt substituentu výrazně ovlivňuje acidobazické vlastnosti azomethinových atomů dusíku. Proto byla v další studii připravena série látek s periferně i neperiferně vázanými substituenty a tyto látky jsme dále studovali. U této série Pc byl popsán vliv polohy a povahy substituentu na bazicitu azomethinových dusíků Pcs na základě stanovených $\log K_1$.