

SOUHRN

Práce se zabývá studiem strukturních, kinetických a dynamických vlastností *O*-propylovaných tetrathiakalix[4]arenů a komplexu derivátu kalix[4]arenu pomocí NMR v kapalně fázi.

Byl monitorován průběh isomerisace 25,26,27,28-tetrapropoxy-2,8,14,20-tetrathiakalix[4]arenu při zvýšené teplotě pomocí ¹H NMR spektroskopie. Po ustavení rovnováhy se podařilo prokázat přítomnost všech čtyř základních konformerů a byly vypočítány kinetické a termodynamické konstanty tohoto systému.

Pomocí 1D NOE spektroskopie byly u 25-monopropoxythiakalix[4]arenu, 25,27-dipropoxythiakalix[4]arenu a 25,26,27-tripropoxythiakalix[4]arenu určeny konformace molekul a vypočítány vzdálenosti mezi některými vodíkovými atomy. První dvě látky zauímají konickou konformaci, trisubstituovaný derivát je v konformaci částečně konické. Byl pozorován vztah mezi geometrií makrocyclu a počtem vodíkových vazeb v molekule.

Byla stanovena přibližná struktura komplexu *o*-toluátu tetrabutylamonium s 5,17-bis(*N'*-fenylureido)-25,26,27,28-tetrapropoxykalix[4]arenem metodou výpočtu kompletní relaxační matice ("Full Relaxation Matrix Approach") ze série 2D NOESY spekter. Vypočítaná data navíc ukazují rozdílnou pohyblivost jednotlivých částí komplexu.

Název diplomové práce:	Studium dynamických a strukturních vlastností calixarenů pomocí NMR spektroskopie
Studijní obor:	Technologie organických látek
Diplomant:	Jiří Vlach
Vedoucí:	Prof. Ing. I. Stibor, CSc.

Práce byla odevzdána dne 10. května 2002

