

# Abstrakt

Abstrakt: Kontrastní látky pro zobrazování magnetickou rezonancí využívají organické komplexy paramagnetických iontů. Tato práce se zabývá studiem rotace fosfonátové skupiny komplexů  $\text{Ln}^{\text{III}}$  s monoylesterem-P kyseliny 1,4,7,10-tetrazacyklododekán-4,7,10-tris(karboxymetyl)-1-metylfosfonové ( $\text{Lndo3ap}^{\text{OEt}}$ ), a to konkrétně  $\text{Lado3ap}^{\text{OEt}}$  a  $\text{Cedo3ap}^{\text{OEt}}$ . Byla změřena  $^1\text{H}$  a  $^{31}\text{P}$  NMR spektra obou komplexů v závislosti na teplotě. Byly odhadnuty příčné relaxační doby a chemické posuvy dvou spektrálních čar  $^{31}\text{P}$ , mezi kterými probíhá chemická výměna. Spektra  $^{31}\text{P}$  byla následně fitována analytickou funkcí popisující tvar spektra s dvoustavovou chemickou výměnou, čímž byly získány závislosti rychlosti výměny a relativních populací obou diastereoizomerů na teplotě. Z těchto závislostí byly určeny termodynamické veličiny charakterizující fosfonátovou rotaci. Byly diskutovány nejistoty získaných veličin a bylo provedeno porovnání rotace fosfonátu s podobnými komplexy. Provedená charakterizace může být následně využita k vývoji nových efektivních kontrastních látek.

Klíčová slova: jaderná magnetická rezonance, kontrastní látka pro MRI, kinetika konformační výměny