

Příloha:**1) Data potřebná k určení asociační konstanty mezi 2 a CB6****Tabulka 1** Navážky a koncentrace pro komplex 2@CB6 při pH=2 a pH=7

pH	Experiment	<i>m</i> [mg]		<i>c</i> [mmol·dm ⁻³]	
		2	CB6	2	CB6
7	1	0,249	0,428	1,014	0,574
7	2	0,242	0,425	0,985	0,570
7	3	0,256	0,433	1,042	0,581
2	1	0,241	0,469	0,981	0,629
2	2	0,232	0,485	0,945	0,651
2	3	0,243	0,465	0,989	0,624

Tabulka 2 Relativní intenzity signálů CB6 a 2 pro komplex 2@CB6 při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β*
1A	8,73	0,98	8,83	1	37,84	14,84
1B	8,9	1,03	8,9	1	38,54	15,36
1C	8,97	0,99	9,07	1	39,16	15,33
2A	7,76	0,88	7,75	1	58,56	13,77
2B	8,19	0,96	8,02	1	61,69	14,63
2C	8,89	1,09	8,88	1	68,35	16,42
3A	8,69	1,02	8,68	1	40,93	14,43
3B	8,29	0,92	8,27	1	39,42	13,94
3C	8,3	1,07	8,37	1	39,55	14,09

Každý experiment (kromě A₂) byl prováděn (1, 2, 3) a měřen 3× (A, B, C), proto jsou v diplomové práci uvedeny i směrodatné odchylky – po provedení Grubbsova testu odlehlých hodnot. Všechny signály byly znormalizovány vůči signálu b*.

Tabulka 3 Relativní intenzity signálů CB6 a 2 pro komplex 2@CB6 při pH=2

Měření	a	a*	b	b*	β	β*
1A	14,11	1,01	14,62	1	74,5	13,39
1B	17,03	1,19	17,23	1	89,89	16,29
1C	15,23	0,91	15,6	1	82,07	14,15
2A	15,78	0,98	16,25	1	89,26	14,37
2B	16,41	1,06	16,47	1	92,86	14,62
2C	16,04	1,04	16,59	1	91,18	13,46
3A	20,23	1,07	20,22	1	106,92	15,41
3B	18,01	1,05	18,15	1	97,23	13,33
3C	17,59	1,08	18,67	1	96,06	13,20

Tabulka 4 Navážky a koncentrace pro komplex 2@CB6,β-CD při pH=2 a pH=7

pH	Experiment	<i>m</i> [mg]		<i>c</i> [mmol·dm ⁻³]	
		2	CB6	2	CB6
7	1	0,248	0,467	1,010	0,626
7	2	0,252	0,464	1,026	0,622
7	3	0,246	0,474	1,002	0,636
2	1	0,240	0,465	0,977	0,624
2	2	0,279	0,470	1,136	0,631
2	3	0,268	0,473	1,091	0,635

Tabulka 5 Relativní intenzity signálů CB6 a **2** pro komplex **2**@CB6, β -CD při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	3,8	0,91	3,37	1	18,16	13,38
1B	3,75	1,08	3,69	1	20,18	14,32
1C	3,59	0,99	3,49	1	18,62	13,68
2A	4,68	1,06	4,48	1	19,62	13,62
2B	4,61	1,1	4,52	1	18,71	12,57
2C	5,06	1,03	4,97	1	20,11	12,92
3A	4,62	1,06	4,73	1	17,91	13,11
3B	4,65	0,96	4,57	1	16,63	12,55
3C	4,96	1,1	4,86	1	18,37	14,07

Tabulka 6 Relativní intenzity signálů CB6 a **2** pro komplex **2**@CB6, β -CD při pH=2

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	3,8	0,91	3,37	1	18,16	13,38
1B	3,75	1,08	3,69	1	20,18	14,32
1C	3,59	0,99	3,49	1	18,62	13,68
2A	4,68	1,06	4,48	1	19,62	13,62
2B	4,61	1,1	4,52	1	18,71	12,57
2C	5,06	1,03	4,97	1	20,11	12,92
3A	4,62	1,06	4,73	1	17,91	13,11
3B	4,65	0,96	4,57	1	16,63	12,55
3C	4,96	1,1	4,86	1	18,37	14,07

Tabulka 7 Navážky a koncentrace pro komplex **2**@CB6, γ -CD při pH=2 a pH=7

pH	Experiment	m [mg]		c [mmol·dm ⁻³]	
		2	CB6	2	CB6
7	1	0,242	0,459	0,985	0,533
7	2	0,242	0,465	0,985	0,541
7	3	0,246	0,489	1,001	0,569
2	1	0,250	0,475	1,018	0,552
2	2	0,243	0,474	0,989	0,551
2	3	0,246	0,489	1,002	0,569

Tabulka 8 Relativní intenzity signálů CB6 a **2** pro komplex **2**@CB6, γ -CD při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	3,72	1,04	3,74	1	14,64	13,68
1B	3,83	0,9	3,69	1	14,68	13,99
1C	4,15	1,01	4	1	15,7	15,13
2A	3,41	0,96	3,39	1	15,99	13,06
2B	4,13	1,04	4,02	1	19,87	16,66
2C	3,56	0,93	3,62	1	16,2	13,16
3A	4,04	1,04	4	1	13,85	13,7
3B	3,82	0,93	3,78	1	13,38	12,99
3C	3,83	1,02	3,69	1	14,76	14,27

Tabulka 9 Relativní intenzity signálů CB6 a 2 pro komplex 2@CB6, γ -CD při pH=2

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	7,24	1,09	7,23	1	22,42	13,31
1B	6,54	1,06	6,38	1	19,8	11,93
1C	6,47	0,98	6,39	1	19,86	11,78
2A	6,8	1,02	6,62	1	23,42	12,86
2B	6,72	0,96	6,47	1	22,48	11,81
2C	6,77	1,06	6,46	1	22,63	12,33
3A	7,08	1,05	7,06	1	22,22	13,05
3B	6,86	1,02	6,57	1	19,75	11,83
3C	6,45	0,98	6,33	1	19,79	11,56

Tabulka 30 Navážky a koncentrace pro komplex 2@CB6,Me- β -CD při pH=7

Experiment	m [mg]		c [mmol·dm ⁻³]	
	2	CB6	2	CB6
1	0,231	0,468	0,940	0,544
2	0,246	0,455	1,002	0,529
3	0,251	0,479	1,023	0,557

Tabulka 11 Relativní intenzity signálů CB6 a 2 pro komplex 2@CB6, Me- β -CD při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	7,25	1	7,08	1	33,65	14,15
1B	7,25	1,01	6,89	1	33,81	14,27
1C	7,34	1,04	7,09	1	33,82	14,31
2A	7,8	1,06	7,67	1	28,23	13,38
2B	7,65	1,07	7,64	1	29,12	13,48
2C	7,54	1,03	7,44	1	28,94	13,56
3A	7,66	1,01	7,59	1	29,61	13,4
3B	7,71	1,03	7,42	1	29,34	13,11
3C	7,8	1,03	7,66	1	30,26	13,58

Tabulka 42 Navážky a koncentrace pro komplex 2@CB6,(2OH-propyl)- β -CD při pH=7

Experiment	m [mg]		c [mmol·dm ⁻³]	
	2	CB6	2	CB6
1	0,238	0,462	0,969	0,537
2	0,247	0,462	1,006	0,537
3	0,238	0,461	0,969	0,536

Tabulka 13 Relativní intenzity signálů CB6 a 2 pro komplex 2@CB6,(2OH-propyl)- β -CD při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β^*
1A	7,25	1	7,08	1	33,65	14,15
1B	7,25	1,01	6,89	1	33,81	14,27
1C	7,34	1,04	7,09	1	33,82	14,31
2A	7,8	1,06	7,67	1	28,23	13,38
2B	7,65	1,07	7,64	1	29,12	13,48
2C	7,54	1,03	7,44	1	28,94	13,56
3A	7,66	1,01	7,59	1	29,61	13,4
3B	7,71	1,03	7,42	1	29,34	13,11
3C	7,8	1,03	7,66	1	30,26	13,58

Tabulka 54 Navážky a koncentrace pro komplex **2@CB6,α-CD** při pH=7

Experiment	<i>m</i> [mg]		<i>c</i> [mmol·dm ⁻³]	
	2	CB6	2	CB6
1	0,264	0,512	1,075	0,595
2	0,250	0,506	1,018	0,588
3	0,272	0,500	1,107	0,581

Tabulka 15 Relativní intenzity signálů CB6 a **2** pro komplex **2@CB6,α-CD** při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β*
1A	7,47	0,97	7,56	1	39,78	13,98
1B	7,69	0,95	7,72	1	40,89	14,6
1C	8,11	1,07	8,22	1	42,58	15,64
2A	7,46	1,05	7,38	1	47,61	14,45
2B	7,15	0,98	7,35	1	45,72	13,83
2C	7,06	1,01	7,24	1	44,9	13,86
3A	12,1	0,92	12,48	1	56,56	14,78
3B	11,87	0,96	12,23	1	55,72	13,93
3C	11,61	0,99	11,46	1	52,96	13,74

Tabulka 64 Navážky a koncentrace pro komplex **2@CB6,Acetyl-β-CD** při pH=7

Experiment	<i>m</i> [mg]		<i>c</i> [mmol·dm ⁻³]	
	2	CB6	2	CB6
1	0,252	0,460	1,026	0,535
2	0,242	0,465	0,985	0,541
3	0,246	0,489	1,002	0,569

Tabulka 15 Relativní intenzity signálů CB6 a **2** pro komplex **2@CB6,Acetyl-β-CD** při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β*
1A	8,58	0,97	8,31	1	41,43	17,25
1B	8,84	0,95	8,5	1	43,4	18,68
1C	8,59	1,04	8,4	1	41,45	17,66
2A	8,95	0,98	8,87	1	53,86	18,35
2B	7,73	1,03	7,72	1	45,47	15,69
2C	7,93	1,05	8,08	1	48,3	16,36
3A	7,59	0,95	7,43	1	40,39	16,14
3B	7,06	1,02	6,87	1	35,63	14,27
3C	7,08	1	7,03	1	37,17	14,75

Tabulka 76 Navážky a koncentrace pro komplex **A₂@CB6** při pH=7

Experiment	<i>m</i> [mg]		<i>c</i> [mmol·dm ⁻³]	
	2	CB6	2	CB6
1	0,272	0,417	1,010	0,560

Tabulka 17 Relativní intenzity signálů CB6 a **A₂** pro komplex **A₂@CB6** při pH=7

Měření	a	a*	b	b*	β	β*
1A	91,58	3,75	91,26	4,25	262,94	36,4

2) Data potřebná k určení asociační konstanty mezi 2 a CD

Tabulka 18 Navážky makrocyclu CD a ligandu 2 pro všechny experimenty

CB6	CD	m [mg]	
		2	CD
-	β-CD	0,291	1,641
1	β-CD	0,229	1,441
-	γ-CD	0,242	1,904
1	γ-CD	0,279	1,989
-	α-CD	0,278	1,475
1	α-CD	0,232	1,451
-	Me-β-CD	0,247	1,929
1	Me-β-CD	0,259	1,948

Tabulka 19 Chemické posuny vybraných signálů komplexu 2@β-CD

CD [ekv.]	δ [ppm]				c [mmol·dm ⁻³]	
	a	b	c	d	CD	2
0	8,747	7,484	7,404	1,972	0,000	1,185
0,2	8,757	7,497	7,411	2,014	0,195	1,077
0,4	8,769	7,512	7,421	2,055	0,357	0,987
0,6	8,777	7,523	7,427	2,095	0,494	0,911
0,8	8,786	7,533	7,433	2,129	0,612	0,846
1,0	8,793	7,542	7,439	2,156	0,714	0,790
1,2	8,799	7,548	7,443	2,173	0,803	0,741
1,4	8,801	7,550	7,444	2,182	0,882	0,697
1,6	8,805	7,554	7,448	2,186	0,952	0,658
1,8	8,805	7,553	7,447	2,186	1,015	0,624
2,0	8,809	7,556	7,450	2,188	1,071	0,592

Tabulka 20 Chemické posuny vybraných signálů komplexu 2@β-CD, CB6

CD [ekv.]	δ [ppm]							c [mmol·dm ⁻³]	
	a	a*	b	b*	c	c*	d	CD	2
0	8,751	8,953	7,490	7,719	7,409	7,290	1,978	0,000	1,026
0,2	8,754	8,972	7,492	7,729	7,408	7,291	2,000	0,194	0,933
0,4	8,762	8,983	7,503	7,741	7,415	7,296	2,034	0,356	0,855
0,6	8,773	8,993	7,517	7,751	7,423	7,301	2,073	0,493	0,789
0,8	8,782	8,998	7,528	7,754	7,430	7,302	2,116	0,610	0,733
1,0	8,791	9,002	7,539	7,758	7,437	7,303	2,151	0,712	0,684
1,2	8,798	9,007	7,547	7,762	7,442	7,305	2,171	0,801	0,641
1,4	8,802	9,004	7,551	7,762	7,444	7,305	2,179	0,879	0,604
1,6	8,805	9,004	7,553	7,763	7,447	7,306	2,184	0,949	0,570
1,8	8,806	9,004	7,554	7,764	7,447	7,306	2,185	1,011	0,540
2,0	8,807	9,003	7,554	7,760	7,447	7,304	2,188	1,067	0,513

Tabulka 21 Chemické posuny vybraných signálů komplexu 2@ γ -CD

CD [ekv.]	δ [ppm]				c [mmol·dm ⁻³]	
	a	b	c	d	CD	2
0	8,748	7,485	7,404	1,974	0,000	0,985
0,2	8,752	7,496	7,401	1,974	0,198	0,896
0,4	8,757	7,507	7,400	1,977	0,362	0,821
0,6	8,760	7,514	7,399	1,978	0,502	0,758
0,8	8,764	7,522	7,399	1,979	0,621	0,704
1,0	8,767	7,527	7,397	1,980	0,725	0,657
1,2	8,770	7,534	7,398	1,982	0,816	0,616
1,4	8,772	7,537	7,396	1,981	0,896	0,580
1,6	8,775	7,542	7,396	1,982	0,967	0,547
1,8	8,775	7,544	7,395	1,982	1,030	0,519
2,0	8,775	7,546	7,393	1,981	1,087	0,493

Tabulka 22 Chemické posuny vybraných signálů komplexu 2@ γ -CD, CB6

CD [ekv.]	δ [ppm]						c [mmol·dm ⁻³]	
	a	a*	b	b*	c	c*	CD	2
0	8,746	8,949	7,483	7,712	7,403	7,282	0,000	1,136
0,2	8,751	9,003	7,493	7,813	7,402	7,222	0,206	1,033
0,4	8,755	9,065	7,504	7,846	7,401	7,203	0,379	0,947
0,6	8,759	9,078	7,511	7,862	7,400	7,190	0,524	0,874
0,8	8,762	9,085	7,519	7,874	7,400	7,182	0,649	0,811
1,0	8,765	9,092	7,524	7,880	7,399	7,177	0,757	0,757
1,2	8,770	9,097	7,531	7,888	7,400	7,176	0,852	0,710
1,4	8,776	9,100	7,534	7,891	7,399	7,174	0,935	0,668
1,6	8,771	9,099	7,537	7,893	7,397	7,171	1,009	0,631
1,8	8,774	9,103	7,543	7,897	7,390	7,172	1,076	0,598
2,0	8,775	9,108	7,545	7,898	7,398	7,170	1,136	0,568

U některých systémů (např. Tabulka 20), nebyly všechny signály dobře rozlišitelné, proto například zde nebyl pro výpočet zahrnut signál d.

Tabulka 23 Chemické posuny vybraných signálů komplexu 2@ α -CD

CD [ekv.]	δ [ppm]				c [mmol·dm ⁻³]	
	a	b	c	d	CD	2
0	8,746	7,483	7,402	1,971	0,000	1,132
0,2	8,747	7,487	7,404	1,975	0,204	1,029
0,4	8,745	7,489	7,403	1,979	0,374	0,943
0,6	8,745	7,492	7,405	1,981	0,518	0,871
0,8	8,746	7,494	7,406	1,984	0,642	0,808
1,0	8,745	7,495	7,406	1,987	0,749	0,755
1,2	8,747	7,498	7,408	1,990	0,842	0,707
1,4	8,745	7,497	7,406	1,992	0,925	0,666
1,6	8,746	7,499	7,408	1,995	0,998	0,629
1,8	8,745	7,500	7,408	1,998	1,064	0,596
2,0	8,744	7,500	7,408	1,998	1,123	0,566

Tabulka 24 Chemické posuny vybraných signálů komplexu **2@ α -CD, CB6**

CD [ekv.]	δ [ppm]						c [mmol·dm ⁻³]	
	a	a*	b	b*	c	c*	CD	2
0	8,745	8,948	7,483	7,712	7,401	7,283	0,000	0,945
0,2	8,745	8,948	7,487	7,713	7,403	7,284	0,201	0,859
0,4	8,744	8,946	7,488	7,712	7,402	7,283	0,369	0,787
0,6	8,743	8,946	7,490	7,712	7,403	7,283	0,511	0,727
0,8	8,743	8,946	7,492	7,713	7,404	7,286	0,632	0,675
1,0	8,744	8,945	7,494	7,713	7,405	7,285	0,738	0,630
1,2	8,743	8,946	7,495	7,711	7,405	7,284	0,830	0,590
1,4	8,743	8,945	7,495	7,713	7,405	7,280	0,911	0,556
1,6	malé změny v ppm, malá intenzita						0,984	0,525
1,8							1,048	0,497
2,0							1,107	0,472

Tabulka 25 Chemické posuny vybraných signálů komplexu **2@Me- β -CD**

CD [ekv.]	δ [ppm]				c [mmol·dm ⁻³]	
	a	b	c	d	CD	2
0	8,745	7,482	7,400	1,970	0,000	1,006
0,2	8,751	7,490	7,403	1,986	0,198	0,914
0,4	8,769	7,513	7,409	2,036	0,364	0,838
0,6	8,784	7,533	7,414	2,077	0,504	0,774
0,8	8,795	7,548	7,416	2,109	0,623	0,718
1,0	8,805	7,561	7,420	2,135	0,727	0,670
1,2	8,812	7,570	7,422	2,152	0,818	0,629
1,4	8,815	7,573	7,422	2,157	0,899	0,592
1,6	8,816	7,573	7,420	2,160	0,970	0,559
1,8	8,817	7,576	7,422	2,166	1,034	0,529
2,0	8,820	7,579	7,424	2,169	1,091	0,503

Tabulka 26 Chemické posuny vybraných signálů komplexu **2@Me- β -CD, CB6**

CD [ekv.]	δ [ppm]							c [mmol·dm ⁻³]	
	a	a*	b	b*	c	c*	d	CD	2
0	8,746	8,948	7,483	7,712	7,402	7,283	1,971	0,000	1,054
0,2	8,765	8,969	7,508	7,719	7,407	7,272	2,025	0,200	0,959
0,4	8,783	8,985	7,533	7,728	7,413	7,266	2,075	0,367	0,879
0,6	8,790	8,997	7,552	7,733	7,417	7,268	2,116	0,508	0,811
0,8	8,808	9,004	7,565	7,738	7,420	7,259	2,141	0,629	0,753
1,0	8,814	9,007	7,571	7,741	7,422	7,254	2,154	0,734	0,703
1,2	8,818	9,006	7,574	7,740	7,422	7,255	2,159	0,826	0,659
1,4	8,817	9,008	7,576	7,742	7,423	7,252	2,163	0,907	0,620
1,6	8,821	9,008	7,580	7,746	7,426	7,255	2,167	0,979	0,586
1,8	8,823	9,011	7,581	7,746	7,426	7,254	2,168	1,044	0,555
2,0	8,822	9,010	7,581	7,749	7,426	7,255	2,170	1,101	0,527