

ABSTRAKT

Název práce: Studium C-C spojování dienů katalyzovaného komplexu ruthenia (II).

Autor: Bc. Eva Hanikýřová

Katedra: Katedra organické a jaderné chemie

Vedoucí diplomové práce: Mgr. Jana Roithová, Ph.D.

Abstrakt

Přechodné kovy katalyzující cykloadice značně přispívají do organické syntézy. Použití ruthenioých komplexů v reakcích tohoto typu je stále významnější vzhledem k jejich známým schopnostem v katalytických tvorbách C-C vazeb přes ruthenacykly jako meziproducty.

V naší studii cykloadičních reakcí katalyzovaných komplexu ruthenia jsme se zaměřili na studium interakce mezi rutheniem (II) a alkeny pomocí hmotnostní spektrometrie s elektrosprejovou ionizací. Tato měkká ionizační technika umožňuje zkoumat pětičlenné ruthenacykly v ionizovaném stavu a dovoluje vzniklé ionty analyzovat MS/MS analýzou. Náš experimentální výzkum je doplněn o kvantově chemické výpočty s použitím metody funkcionálu hustoty.

Tato práce vede k detailnějšímu porozumění mechanismů reakcí dienů katalyzovaných komplexu ruthenia.

Klíčová slova

Chemie v plynné fázi, Reakční mechanismy, Elektrosprejová ionizace, $[\text{CpRu}(\text{CH}_3\text{CN})_3]\text{PF}_6$, Hmotnostní spektrometrie, Katalyzátor.