

Abstrakt

Katalýza zlatem v poslední době zažívá nevídaný rozmach a ve vědecké komunitě je jí věnovaná velká pozornost. Příval nových reakcí katalyzovaných zlatnými kationty je natolik značný, že o mechanismech mnoha těchto reakcí je známo jen velmi málo. Výzkum reakčních mechanismů (nejen daných) reakcí je proto velmi důležitou součástí vědeckého poznání a dalšího zlepšování reakcí katalyzovaných zlatnými kationty. Vznik kationtových π -komplexů je považován za první krok v mechanismech těchto reakcí. V této práci byly studovány vazebné disociační energie mezi různě substituovanými nenasycenými uhlovodíky (alkeny, alkadieny, alkyny a alleny) s kationty stříbra či zlata s různými ligandy (trifenylfosfin, acetonitril) v π -komplexech v plynné fázi pomocí hmotnostní spektrometrie a výpočetní chemie. Na základě zjištěných výsledků je diskutován možný „efekt stříbra“ v katalýze zlatem.

Klíčová slova

katalýza, zlato, stříbro, hmotnostní spektrometrie, DFT výpočty, reakční intermediáty