

Souhrn

Tato dizertace se zabývá komplexy mědi a jejich reaktivitou v plynné fázi. Komplexy byly analyzovány hmotnostní spektrometrií s elektrosprejovou ionizací (ESI-MS), infračervenou multifotonovou fotodisociační spektroskopií (IRMPD) a teoretickými výpočty.

V první části dizertace jsem studovala komplexy mědi s redox-aktivními ligandy (catechol, maltol a 9,10-fenantrachinon) a porovnávala jsem jejich strukturu a reaktivitu s analogickými komplexy jiných kovů. Struktura komplexů jsem studovala pomocí kolizně indukované disociace (CID) a IRMPD spektroskopie. Redoxní vlastnosti komplexů mědi byly studovány a určeny na základě odlišných frekvencí C-O vibrací a CID fragmentačních experimentů. Komplexy s fenantrachinonem a maltolem vykazovaly redoxní aktivitu.

V druhé části práce byly zkoumány negativně nabitě komplexy mědi s chelatujícím ligandem L (L = *N,N'*-bis(2,6-diisopropylfenyl)-2,6-pyridindikarboxamid) a různými protiionty. Pozorovala jsem, že elektrosprejová ionizace komplexů s chlorečnanem jako protiiontem vede ke vzniku komplexů $[\text{Cu}^{\text{III}}(\text{L}-2\text{H})(\text{O})]^-$. Dále byly studovány jiné měďnaté komplexy, konkrétně $[\text{Cu}(\text{L}-2\text{H})(\text{CH}_3\text{COO})]^-$ a $[\text{Cu}(\text{L}-2\text{H})(\text{CH}_3\text{O})]^-$. CID experimenty v případě $[\text{Cu}(\text{L}-2\text{H})(\text{CH}_3\text{COO})]^-$ ukázaly, že se tento komplex rozpadá za ztráty acetoxy radikálu, nebo kyseliny octové. Fragmentace komplexu $[\text{Cu}(\text{L}-2\text{H})(\text{CH}_3\text{O})]^-$ vede k redoxním procesům a přesmykům.

V poslední části byla studována tvorba a reaktivita měditých oxo komplexů s monodentátními a bidentátními ligandy. ESI ionizace směsi ligandu a chlorečnanu měďnatého se ukázala jako efektivní metoda pro generování měditých oxo komplexů $[(\text{L})\text{CuO}]^+$. Připravené oxo komplexy vykazují charakteristickou eliminaci atomu kyslíku při CID. Dále byla zkoumána reaktivita těchto iontů s vodou, ethanem, ethylenem a cyclohexa-1,4-dienem v plynné fázi. Komplex $[(\text{MeCN})\text{CuO}]^+$ dokáže oxidovat vodu a aktivovat a hydroxylovat C-H vazbu ethanu. Komplexy s bidentátními ligandy s vodou nereagují a oxidují pouze delší uhlovodíky. Všechny studované komplexy epoxidují ethylen se srovnatelnou reakční rychlostí.