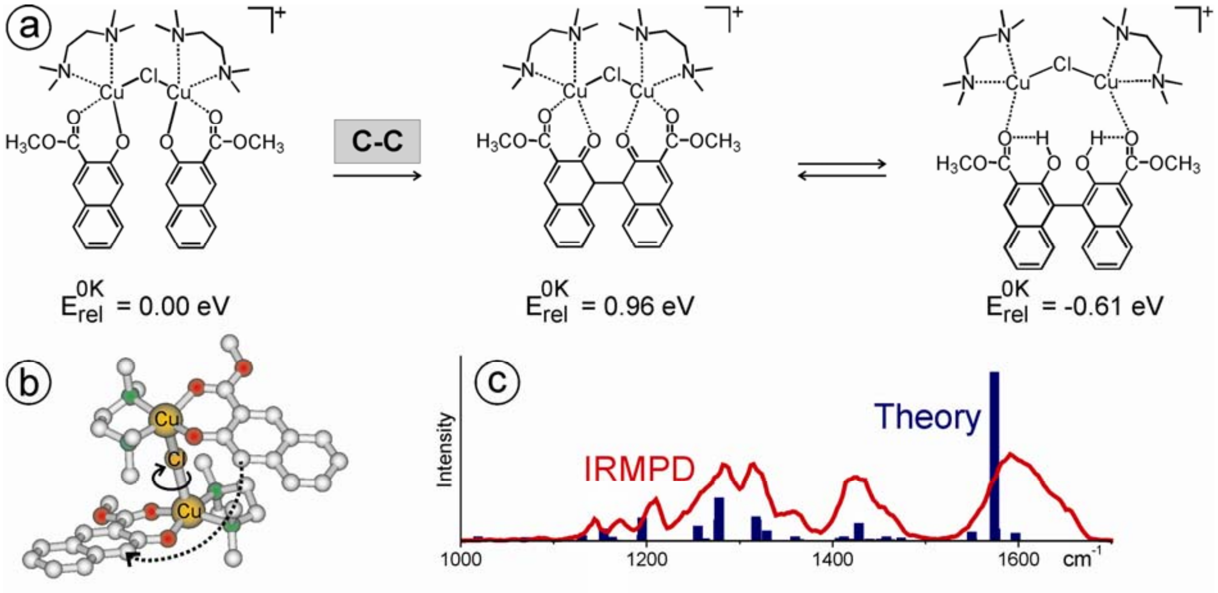
Mechanismus C-C spojení dvou molekul naftolu katalyzovaný mědí

Pomocí hmotnostní spektrometrie, infračervené spektroskopie isolovaných iontů a teoretických výpočtů jsme ukázali, že jeden atom mědi nestačí na aktivaci naftolu pro kapling s druhou molekulou naftolu. Ke spojení naftolů dochází v *ad hoc* vytvořených binukleárních klastrech se dvěma atomy mědi, kde každý atom mědi aktivuje jednu molekulu naftolu. Klastry lze přenést z reakční směsi do plynné fáze pomocí elektrosprejové ionizace. Isolované ionty jsme charakterizovali pomocí infračervených spekter a ukázali jsme, že po „zahřátí“ IČ fotony dochází k C-C spojení obou naftolů. Reakce je řízena následnou keto-enol tautomerií produktu. Alternativní produkty O-O spojení nebo O-C spojení jsou energeticky nevýhodné. Práce „Naphthol Coupling Monitored by Infrared Spectroscopy in the Gas Phase“ je publikována v časopisu *Journal of the American Chemical Society* (**2010**, *132*, 281).



Obr. 1. a) Mechanismus C-C spojení dvou molekul naftolu (pro reakci byl použitý methyl ester 3-hydroxy-2-naftoové kyseliny a katalyzátor Cu(OH)Cl•TMEDA); výpočty byly provedeny pomocí metody DFT. b) Nejstabilnější struktura reaktivního klastru (vodíkové atomy jsou vymazány); šipky naznačují, jak dochází k reakci. c) porovnání experimentálního a teoretického IČ spektra reaktivního klastru.