

UNIVERSITETI I PRISHTINËS
FAKULTETI I SHKENCAVE MATEMATIKO-NATYRORE
DEPARTAMENTI I KIMISË



Teza e Masterit

**Sinteza e ligandëve që përmbajnë azot, hulumtimi i
komplekseve të Cu(I) dhe Cu(II) si dhe i reaksioneve të tyre
me O₂ and H₂O₂**

Mentorët:

Prof. Dr. Siegfried Schindler

Prof. Dr. Richard Göttlich

Prof. Dr. Arben Haziri

Kandidati:

Teuta Halili

Prishtinë, Prill 2026

Abstrakt (i zgjeruar)

Ky punim masteri trajton sintezën e ligandëve që përmbajnë azot, studimin e komplekseve të bakrit në gjendjet oksiduese Cu(I) dhe Cu(II), si dhe analizën e reaksioneve të tyre me oksigjenin molekular (O_2) dhe peroksidin e hidrogjenit (H_2O_2). Kjo fushë kërkimore bën pjesë në kiminë bioinorganike dhe katalizën e gjelbër, duke synuar zhvillimin e sistemeve biomimetike që imitojnë funksionet e enzimave natyrore të bakrit në aktivizimin e oksigjenit dhe në reaksionet oksiduese.

Në dekadat e fundit, kataliza e bazuar në metale tranzite, veçanërisht ajo e bakrit, ka marrë një rëndësi të madhe për shkak të potencialit të saj në zhvillimin e proceseve kimike më të qëndrueshme dhe miqësore me mjedisin. Bakri është një metal relativisht i bollshëm, me toksicitet të ulët dhe me aftësi të shkëlqyera për të kaluar midis gjendjeve të ndryshme oksiduese, gjë që e bën atë ideal për procese redoks. Në natyrë, enzimat e bakrit luajnë rol kyç në aktivizimin e molekulave të qëndrueshme si oksigjeni molekular, duke mundësuar transformime të rëndësishme biologjike. Ky punim synon të kuptojë dhe të imitojë këto procese përmes sistemeve model.

Në pjesën e parë të punimit trajtohen konceptet bazë të katalizës në oksidimet e gjelbra dhe rëndësia e përdorimit të oksidantëve të pastër si O_2 dhe H_2O_2 . Këta oksidantë janë të favorshëm pasi prodhojnë nënprodukte minimale dhe të padëmshme, kryesisht ujë, duke përmbushur parimet e kimitisë së gjelbër. Megjithatë, për shkak të natyrës së tyre elektronike, veçanërisht në rastin e O_2 , aktivizimi i tyre kërkon praninë e katalizatorëve metalikë që mund të ndërmjetësojnë transferimin e elektroneve dhe të stabilizojnë ndërmjetësit reaktivë.

Një pjesë e rëndësishme e studimit fokusohet në rolin e ligandëve në stabilizimin dhe kontrollin e reaktivitetit të komplekseve të bakrit. Janë sintetizuar dhe karakterizuar ligandë të ndryshëm që përmbajnë azot, përfshirë ligandët L1 dhe L2, të cilët shërbejnë si platforma për koordinimin e joneve të bakrit. Dizajni i ligandëve është thelbësor, pasi ai ndikon drejtpërdrejt në gjeometrinë, vetitë elektronike dhe stabilitetin e komplekseve metalike, si dhe në aftësinë e tyre për të aktivizuar molekulat e oksigjenit.

Në pjesën eksperimentale, është realizuar sinteza e ligandëve përmes metodave organike standarde dhe janë formuar komplekset përkatëse me Cu(I) dhe Cu(II). Këto komplekse janë studiuar në reaksion me H₂O₂ dhe O₂, duke përdorur teknika spektroskopike si UV-Vis dhe metoda kinetike si stopped-flow. Këto analiza kanë mundësuar identifikimin e ndërmjetësve reaktivë dhe studimin e mekanizmave të reaksionit.

Rezultatet tregojnë se komplekset Cu(II) reagojnë me H₂O₂ duke formuar specie të ndryshme oksigjeni reaktive, të cilat mund të përfshihen në procese oksidimi. Nga ana tjetër, komplekset Cu(I) reagojnë me O₂ për të formuar ndërmjetës si superoksidet dhe peroksidet e bakrit, të cilat janë të rëndësishme për kuptimin e mekanizmave biomimetikë. Stabiliteti dhe reaktiviteti i këtyre specieve varen në mënyrë të ndjeshme nga struktura e ligandit dhe kushtet e reaksionit.

Një aspekt i rëndësishëm i këtij punimi është krahasimi i sjelljes së sistemeve të ndryshme ligand–bakër dhe ndikimi i tyre në formimin e ndërmjetësve Cu/O₂. Është vërejtur se ligandët me strukturë më të organizuar dhe me donorë të fortë azoti mund të stabilizojnë më mirë këto ndërmjetës dhe të kontrollojnë më saktë rrugët reaksionare. Kjo është në përputhje me sjelljen e enzimave natyrore, ku mjedisi proteinik rreth qendrës metalike luan rol vendimtar në funksionin katalitik.

Përveç kësaj, janë kryer studime kristalografike për disa prej ligandëve dhe komplekseve të tyre, duke siguruar informacion të detajuar mbi strukturën e tyre molekulare. Këto të dhëna strukturore janë thelbësore për të kuptuar marrëdhënien midis strukturës dhe reaktivitetit.

Në përfundim, ky punim kontribuon në fushën e kimisë bioinorganike duke ofruar njohuri të reja mbi sintezën dhe reaktivitetin e komplekseve të bakrit me ligandë që përmbajnë azot. Studimi demonstroi rëndësinë e dizajnit të ligandëve në kontrollin e proceseve redoks dhe në stabilizimin e ndërmjetësve reaktivë të oksigjenit. Këto rezultate kanë implikime të rëndësishme për zhvillimin e katalizatorëve të rinj të qëndrueshëm dhe për kuptimin më të thellë të mekanizmave të enzimave të bakrit.

Në perspektivë, kërkimet e ardhshme mund të përqendrohen në optimizimin e mëtejshëm të strukturës së ligandëve për të arritur selektivitet dhe efikasitet më të lartë në reaksionet oksiduese, si dhe në aplikimin e këtyre sistemeve në procese praktike industriale. Për më tepër, kombinimi i studimeve eksperimentale me metoda teorike si DFT mund të ofrojë një kuptim më të plotë të mekanizmave reaksionarë dhe të udhëheqë dizajnin racional të sistemeve të reja katalitike.