

Projekt 2.5 Synteza zakrzywionych pochodnych acenów - w kierunku oddolnej syntezy nanorurek węglowych typu zig-zag

Promotor: prof. Daniel T. Gryko / dr Marek Grzybowski

Instytut: Chemii Organicznej

Jednostka organizacyjna: Instytut Chemii Organicznej PAN

www: <https://www.icho.edu.pl/zespol/daniel-gryko/grzybowski-marek/>

Opis:

Doktorant będzie odpowiedzialny za syntezę bloków budulcowych, nienaprzężonych makrocyclicznych prekursorów oraz ich konwersję do pochodnych zakrzywionych acenów. Zdobyta wiedza i doświadczenie zostanie wykorzystane w próbach syntezy stabilnych pochodnych cyklacenu – prekursorów do oddolnej syntezy nanorurek węglowych typu zig-zag.

Cel projektu:

Celem projektu jest opracowanie skutecznych reakcji zwiększających naprężenie układu acenowego, pozwalających na syntezę stabilnych pochodnych cyklacenu. Badania te zostaną przeprowadzone przy użyciu zakrzywionych analogów acenów jako uproszczonych, małowymiarowych modeli odpowiednich cyklacenu. Wybór obiecujących ścieżek syntetycznych zostanie wstępnie dokonany w oparciu o wyniki modelowania teoretycznego przy użyciu Teorii Funkcjonału Gęstości. Najbardziej obiecujące ścieżki zostaną wykorzystane najpierw w syntezie zakrzywionych pochodnych acenów z krzywizną wymuszoną poprzez mostek alkilowy. Jeśli synteza ta się powiedzie, zgromadzona wiedza i opracowana metodyka zostanie użyta w syntezie trwałej pochodnej cyklacenu.

Wymagania:

- Doktorant/ka powinien posiadać stopień naukowy magistra w dziedzinie nauk chemicznych oraz doświadczenie w pracy w laboratorium syntezy organicznej
- powinien również posiadać szeroką wiedzę na temat nowoczesnej metodologii syntezy organicznej oraz znać podstawowe techniki spektroskopowe używane do charakteryzacji związków organicznych (NMR, MS),
- dodatkowymi atutami będą: doświadczenie w syntezie policyklicznych związków aromatycznych lub barwników oraz znajomość metod obliczeń kwantowo-chemicznych (DFT).