

Projekt 2.5 Inicjowana rodnikami alkoksyłowymi samo- lub wspomagana grupą kierującą foto-C-H funkcjonalizacja związków bifunkcyjnych

Promotor: dr hab. Sebastian Stecko, prof. nadzw. IChO PAN

Instytut: Instytut Chemii Organicznej PAN

Jednostka organizacyjna: zespół XX1

www: www.steckogroup.pl

Opis:

W ramach realizacji projektu doktorant/ka będzie odpowiedzialny/a za:

- syntezę wybranych związków modelowych,
- optymalizację procesu samo-C-H funkcjonalizacji inicjowanych rodnikiem alkoksyłowym na wybranych związkach modelowych bifunkcyjnych,
- optymalizację kierowanej grupą pomocniczą zdalnej C-H funkcjonalizacji związków bi-funkcyjnych,
- ocenę zakresu stosowalności obu wariantów C-H funkcjonalizacji, poprzez rozszerzenie puli substratów, sprawdzenie chemoselektywności procesu, oraz opracowanie warunków reakcyjnych umożliwiających przeprowadzenie reakcji w wariacie enancjoselektywnym,
- badania mechanistycznych z wykorzystaniem obliczeń kwantowo-mechanicznych,
- wykorzystanie opracowanej metody C-H funkcjonalizacji w syntezie wybranych złożonych substancji bioaktywnych i farmakologicznych,
- przeprowadzenie pełnej charakterystyki uzyskanych substancji organicznych z wykorzystaniem metod spektroskopowych i pomiarów fizykochemicznych,
- analizę danych eksperymentalnych, przygotowanie raportów, przygotowanie materiału do publikacji.

Cel projektu:

Celem niniejszego projektu, finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki, jest opracowanie wydajnych i selektywnych metod bezpośredniej C(sp³)-H funkcjonalizacji związków bi- i polifunkcyjnych. Kluczowym zadaniem będzie opracowanie warunków samoaktywacji substratów z wykorzystaniem alkoksyłowych rodników celem zainicjowania procesu C-H aktywacji lub też wykorzystanie w tym celu odpowiednio dobranej pomocniczej grupy aktywująco-kierującej. Szczególny nacisk położony zostanie na wykorzystaniu nowoczesnych metod C-H aktywacji z wykorzystaniem procesów fotoredoks i reakcji elektrochemicznych. Z uwagi na to wcześniejsze doświadczenie Kandydata/tki w tych obszarach nowoczesnej syntezy organicznej będzie dodatkowym atutem.

Zadaniem Kandydat/ka będzie synteza substratów, bloków budulcowych, oraz badania nad inicjowaną rodnikami amidylowymi C(sp³)-H funkcjonalizacją wybranych modelowych związków bifunkcyjnych w oparciu o reakcje fotoredoks i/lub procesy elektrochemiczne (optymalizacja, zakres stosowalności, aplikacyjność). Kandydat/ka będzie odpowiedzialny/a również za rejestrację i interpretację danych spektralnych, projektowanie eksperymentów, oraz przygotowywanie raportów i materiałów do publikacji. Osobnym zagadnieniem będzie próba opracowania warunków C-H funkcjonalizowania w wariacie asymetrycznym celem syntezy związków enancjomerycznie wzbogaconych. Dodatkowym aspektem będą samodzielne lub we współpracy z innymi zespołami, studia mechanistyczne z wykorzystaniem nowoczesnych technik chemii obliczeniowej.

Ponadto Kandydat/ka będzie uczestniczył/a w życiu naukowym instytutu poprzez udział w seminariach zespołowych i instytutowych. Doktorant/ka będzie również uczestniczył/a w serii wykładów kursowych dotyczących wybranych aspektów zaawansowanej chemii organicznej i spektroskopii.

Wymagania:

- stopień magistra/magistra inżyniera nauk chemicznych (specjalność – chemia organiczna),
- szeroka wiedza w obszarze chemii organicznej, znajomość metod spektralnych wykorzystywanych w chemii organicznej,
- dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie, umożliwiająca sprawną komunikację w międzynarodowym zespole, swobodną pracę z anglojęzyczną literaturą fachową oraz przygotowywanie raportów, tekstów publikacji czasopism naukowych,
- motywacja, ciekawość, kreatywność, umiejętność pracy samodzielnie jak i w zespole,

Opcjonalne kompetencje będące dodatkowymi atutami kandydata/tki

- zainteresowanie i wcześniejsze doświadczenie w prowadzeniu reakcji katalizowanymi kompleksami metali przejściowych, chemią rodników, wiedza i doświadczenie w pracy z substancjami wrażliwymi na wilgoć i powietrze, znajomość zaawansowanych technik laboratoryjnych w tym technik Schlenka,
- znajomość metod obliczeniowych kwantowo-mechanicznych,
- wcześniejsze doświadczenie w fotochemii lub elektrochemii będzie dodatkowym atutem;