

1. Raziskovalna organizacija:

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

2. Ime in priimek mentorja:

Marijan Kočevar

3. Področje znanosti iz šifranta ARRS:

1.04. Kemija (1.04.04 Organska kemija)

4. Kontaktni e-naslov mentorja:

Marijan.kocevar@fkkt.uni-lj.si

5. Kratek opis programa usposabljanja:

Z bakrom katalizirana 1,3-dipolarna cikloadicija med terminalnimi alkini in organskimi azidi omogoča enostavno in modularno sintezo 1,4-disubstituiranega 1,2,3-triazola. Dejstvo, da lahko slednji kot ligand sodeluje v koordinaciji z različnimi kovinami in na različne načine, je nedavno vzpodbudilo številne raziskave na področju koordinativne kemije in aplikacij v katalizi, metalosupramolekularni kemiji, fotofiziki in medicini. Relativno nova na tem področju je ugotovitev, da lahko 1,3,4-trisubstituiran 1,2,3-triazol-5-iliden, pripravljen iz omenjenega 1,4-disubstituiranega 1,2,3-triazola, služi kot mezoinski karbenski ligand v organokovinski kemiji. Poseben primer so derivati 1,2,3-triazolov, funkcionalizirani s heterocikličnim obročem, saj v koordinativni kemiji nudijo še posebej zanimive možnosti bidentatne koordinacije.

Mladi raziskovalec bo študiral organokovinske spojine s piridil-substituiranimi triazol-5-ilideni kot bidentatnimi karbenskimi ligandi. Osredotočil se bo na kovine prehoda, s posebnim poudarkom na paladiju(II). V tem primeru je pričakovati nastanek kvadratno planarne arhitekture z bis-bidentatno koordinacijo dveh piridil-triazol-5-ilidenskih ligandov. Relativno močna Pd-karben vez bo pripomogla k stabilizaciji kompleksa, šibkejša koordinativna Pd-piridin vez pa bo do paladija omogočila relativno prost dostop. Tako bo zadoščeno vsem pogojem, ki jih mora izpolniti katalizator na osnovi kovin prehoda. Nastale organokovinske spojine bo mladi raziskovalec preizkusil kot homogene predkatalizatorje za tvorbo C-C in C-heteroatom vezi. Poseben poudarek bo na Sonogashira in Suzuki-Miyaura reakciji pod zelenimi reakcijskimi pogoji.

Da bi prispeval k večjemu razumevanju in potencialni izboljšavi katalitskih sistemov z zgoraj omenjenimi kompleksi bo mladi raziskovalec študiral mehanizem predvsem z modernimi NMR spektroskopskimi tehnikami in masno spektrometrijo ter z elektrokemijskimi metodami, kot je ciklična voltametrij. Dobljene rezultate bo ovrednotil z metodami teoretične kemije. V ta namen se bo mladi raziskovalec aktivno vključil tudi v sodelovanje z raziskovalnima skupinama prof. Franka de Profta (Vrije Universiteit Brussel) in prof. Biprajita Sarkarja (Freie Universität Berlin), s katerima ima programska skupina večletna sodelovanja in številne skupne objave rezultatov v uglednih znanstvenih revijah.

Mladi raziskovalec se bo v času izpopolnjevanja naučil samostojnega planiranja eksperimentalnega dela, kritičnega razmišljanja in objektivnega ovrednotenja ter predstavitve znanstvenih rezultatov. Osvojil bo principe dobre laboratorijske prakse.