



Информация за финансиран проект

Наименование на конкурса:
Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2018 г.
Основна научна област или обществен приоритет:
Химически науки/Нанонауки, нови материали и технологии
Входящ № на проект:
H29/22
Заглавие на проекта:
ЯМР спектроскопия с <i>in situ</i> облъчване при дизайн на нови функционални материали (LED-NMR)
Базова организация:
Институт по Органична химия с Център по Фитохимия, БАН
Партньорски организации:
Няма
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Професор д-р Николай Георгиев Василев
Общ размер на отпуснатото финансиране:
120 000 лв.
Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите
Организация:
Институт по Органична химия с Център по Фитохимия, БАН
Сума: 120 000 лв.
Организация:
Сума:
Организация:
Сума:
Организация:
Сума:



Резюме на проекта:

ЯМР спектроскопията с *in situ* облъчване включва осветяване на пробата вътре в ЯМР спектрометъра. Тази постановка, която включва LED устройства като източници на светлина, позволява приложение на цялото разнообразие от ЯМР методи при фотохимични реакции. В допълнение към стандартните ЯМР спектрални подходи приложими за реакции на тъмно, специална хиперполяризационна техника приложима изключително за фотореакции, Photo-CIDNP спектроскопията, осигурява молекулен отпечатък на реакционните интермедиати в наносекундната скала на времето.

Настоящият проект се фокусира върху приложението и развитието на тази методология върху целеви системи с вътрешномолекулен пренос на протон. Тези системи често са изградени от база и фенолна група, способна да образува водородна връзка. В такива системи, пренос на електрон (ET) и пренос на протон (PT) от фенола към базата може да се осъществи чрез последователен (ET/PT или PT/ET) или съгласуван процес на пренос на електрон-протон (EPT). Използвайки зависеща от времето CIDNP спектроскопия, метод осигуряващ регистриране на кратко живущи интермедиати чрез техните дълго живущи диамагнитни продукти, може да докаже механизма на окислително-редукционния процес.

Настоящият проект включва и разработване на методология за втори тип целеви системи, в които стандартните ЯМР спектрални техники не позволяват еднозначно определяне на структурата на неизвестни съединения поради наличие на динамично равновесие между няколко възможни форми при стайна температура в допълнение към наличието на вътрешномолекулен/междумолекулен пренос на протон. Междинен обмен води до значително уширяване на сигналите в ЯМР спектрите, а често те са скрити в шума.

Конкретни обекти за изследване са 4-хидрокси-1-нафталдехиди и 4-хидрокси-3-(пиперидин-1-илметил)-1-нафталдехиди (кандидати за молекулни превключватели на базата на вътрешномолекулен пренос на протон), както и меламинови производни (с приложение като луминисцентни течни кристали, редокс активни хромофори, фотоволтаични устройства, материали с двуфотонно поглъщане и сини фосфоресцентни органични светодиоди (OLED)).



Членове на научния колектив

<i>Организации/участници</i> ¹	<i>Бележка</i> ²
Базова организация:	
Институт по Органична химия с Център по Фитохимия, БАН	
Ръководител на научния колектив	
проф. д-р Николай Георгиев Василев	
Участници:	
проф. дхн Светлана Димитрова Симова	
проф. дхн Людмил Манолов Антонов	
проф. д-р Павлета Стоянова Шестакова	
доц. д-р Георги Милчев Добриков	
гл. ас. д-р Явор Николаев Митрев	
гл. ас. д-р Александър Асенов Кантарджиев	ПД
гл. ас. д-р Мирослав Георгиев Дангалов	МУ, ПД
гл. ас. д-р Яна Иванова Николова	МУ, ПД
гл. ас. д-р Вера Венциславова Денева	МУ, ПД
докторант Ивайло Момчилов Славчев	ДО
докторант Десислава Пламенова Гергинова	ДО
докторант Силвия Христова Христова	ДО

Общ брой млад учен (МУ) 3

Общ брой постдокторант (ПД) 4

Общ брой докторанти (ДО) 3

Общ брой студенти (СТ) няма

¹ Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник

² Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), пенсионер (ПН) или учен от чужбина (УЧ) и съответната бройка.