

Информация за финансиран на проект

Наименование на конкурса:
Петър Берон и НИЕ
Основна научна област:
Химия
№ на договор:
КП-06-ДБ-5
Начална дата на проекта и срок на договора:
01 март 2021; 18 месеца
Заглавие на проекта:
Реалистично моделиране на енантоселективното арилиране на алифатни енони катализирано от комплекси на родий с хирални диени чрез аб иницио динамика
Базова организация:
СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по Химия и Фармация
Партньорски организации:
няма
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Доц. Петко Петков
Общ размер на договореното финансиране:
90 000 лв

Резюме на проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):

Молекулното моделиране (с крайна цел компютърен дизайн на хирален лиганд) е един от най-важните подходи за изследване на асиметричната индукция в хода на енантиселективния катализ. Реалистичното моделиране повишава качеството на модела и вероятността за успех в дизайна. Най-често използваният метод базиран на теория на плътностния функционал (DFT) не позволяват реалистично моделиране. За да преодолеем това, ще използваме *ab initio* молекулярна динамика (AIMD), за да а) изследваме процеса на хирална индукция при изрично солватиране; б) симулираме реакцията в присъствието на множество копия на субстрата, наподобяващо истинските експериментални условия. Ще изследваме арилирането на ненаситени кетони катализирано от Rh (I) комплекси с хирални диени поради синтетичното му значение, отлично характеризирани на атомно ниво както от експериментална, така и от теоретична гледна точка, включително успешен компютърен дизайн на нов и potentен диенов лиганд.

Членове на научния колектив

Организации/участници ¹	Бележка ²
Базова организация:	
СУ „Св. Климент Охридски”, Факултет по Химия и Фармация	
Ръководител на научния колектив	
Доц. Петко Петков	
Участници:	
Др. Асен Б. Кънчев	УЧ
Партньорска организация:	
няма	
Участници:	
Партньорска организация:	
няма	
Участници:	
Партньорска организация:	
няма	
Участници:	

1 Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

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