

Rekrutacja do Szkoły Doktorskiej w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach na rok akademicki 2026/2027

Admission to the Doctoral School at the University of Silesia in Katowice for academic year 2026/2027

<p>Nauki chemiczne temat nr 12</p>	<p>Chemical sciences topic No. 12</p>
<p>Synteza i badanie wpływu podstawników na tautomerię ketonowo-enolową w strukturze sześciocząłonowej, z uwzględnieniem heteroatomów (np. N i O), obejmujące proces przeniesienia protonów w stanie wzbudzonym zarówno w systemie wewnątrz- jak i międzycząstec</p>	<p>Synthesis and investigation of the effect of substituents on keto–enol tautomerism in six-membered structures containing heteroatoms (e.g. N and O), including proton transfer processes in the excited state in both intra- and intermolecular systems</p>
<p>PhD supervisor: dr hab. inż. Mateusz Korzec, prof. UŚ</p>	
<p>Krótką charakterystyka założeń i celów badawczych Celem projektu byłaby synteza oraz badanie wpływu podstawników na zjawisko tautomerii keto–enolowej w sześciocząłonowych układach heterocyklicznych zawierających heteroatomy np. azotu i tlenu. Główny nacisk w pracy kładziony będzie na syntezę odpowiednich układów, szeroki zakres badań spektroskopowych w roztworze (absorpcja i emisja) oraz analizę mechanizmu transferu protonu w stanie wzbudzonym, zarówno w układach wewnątrzcząsteczkowych, jak i międzycząsteczkowych. Ważnym również aspektem będzie określenie czynników strukturalnych i środowiskowych determinujących przebieg tego procesu. W zakresie badań i we współpracy z innymi ośrodkami, możliwe będzie podjęcie wysiłków badawczych dotyczących tautomerii ketonowo-enolowych w ciele stałym. Założenia projektu obejmują: 1. Zakłada się, że sześciocząłonowe układy heterocykliczne zawierające heteroatomy np. N i O stanowią odpowiednie modele do analizy wpływu podstawników na tautomerizm keto–enolowy. 2. Przyjmuje się, że rodzaj podstawnika (donorowy lub akceptorowy) istotnie wpływają na położenie równowagi keto–enolowej oraz na efektywność transferu protonu. 3. Przyjmuje się, że proces transferu protonu w stanie wzbudzonym, zachodzi według odmiennych</p>	<p>Brief description of research assumptions and goals The project's goal is to synthesize and study the effect of substituents on keto-enol tautomerism in six-membered heterocyclic systems containing heteroatoms, such as nitrogen and oxygen. The primary focus of this work will be on the synthesis of suitable systems, a wide range of spectroscopic studies in solution (absorption and emission), and analysis of the mechanism of excited-state proton transfer, both in intramolecular and intermolecular systems. Determining the structural and environmental factors that determine this process will also be important. Within this research framework and in collaboration with other centers, research efforts on keto-enol tautomerism in solids will be undertaken. The project's assumptions include: 1. It is assumed that six-membered heterocyclic systems containing heteroatoms, such as N and O, constitute suitable models for analyzing the effect of substituents on keto-enol tautomerism. 2. It is assumed that the type of substituent (donor or acceptor) significantly influences the keto-enol equilibrium and the efficiency of proton transfer. 3. It is assumed that the excited-state proton transfer process occurs according to different mechanisms in intra- and intermolecular systems. 4. It is assumed that interactions of compounds with solvents and the formation of hydrogen bonds play</p>

<p>mechanizmów w układach wewnątrz- i międzycząsteczkowych.</p> <p>4. Zakłada się, że oddziaływania związków z rozpuszczalnikiem oraz tworzenie się wiązań wodorowych spełniają kluczową rolę w stabilizacji określonych form tautomerycznych.</p> <p>5. Przyjmuje się, że połączenie metod syntetycznych, spektroskopowych (UV-Vis, fluorescencja, NMR) oraz obliczenia kwantowo-chemicznych umożliwią pełną charakterystykę badanych zjawisk.</p> <p>6. Zakłada się, że uzyskane wyniki mogą mieć znaczenie dla projektowania nowych materiałów funkcjonalnych oraz związków o właściwościach fotofizycznych i fotochemicznych.</p>	<p>a key role in the stabilization of specific tautomeric forms.</p> <p>5. It is assumed that a combination of synthetic methods, spectroscopic methods (UV-Vis, fluorescence, NMR), and quantum chemical calculations will enable a comprehensive characterization of the phenomena studied.</p> <p>6. It is assumed that the obtained results may be important for the design of new functional materials and compounds with photophysical and photochemical properties.</p>
<p>Planowany wkład w rozwój dyscypliny</p> <p>Projekt przyczyni się do rozwoju chemii organicznej i fizycznej poprzez pogłębienie wiedzy na temat tautomerii keto–enolowej w sześcioczłonowych układach heterocyklicznych zawierających heteroatomy: np. azotu i tlenu. Przeprowadzone badania umożliwią systematyczną ocenę wpływu podstawników o zróżnicowanym charakterze elektronowym i sterycznym na położenie równowagi tautomerycznej, co pozwoli na sformułowanie ogólnych zależności struktura–właściwości dla tej klasy związków.</p> <p>Istotnym elementem projektu jest analiza procesu transferu protonu w stanie wzbudzonym, prowadzona zarówno dla mechanizmów wewnątrzcząsteczkowych, jak i międzycząsteczkowych. Uzyskane wyniki poszerzą aktualny stan wiedzy dotyczący roli heteroatomów N i O oraz oddziaływań wodorowych w procesach fotofizycznych zachodzących w stanie wzbudzonym. Połączenie metod syntetycznych, spektroskopowych oraz obliczeń kwantowo-chemicznych pozwoli na uzyskanie nowych danych eksperymentalnych i ich interpretację na poziomie molekularnym. Rezultaty projektu stanowić będą wartościowy wkład w badania nad mechanizmami tautomerii oraz dynamiką transferu protonu, a także mogą stanowić podstawę do dalszych prac nad projektowaniem związków o kontrolowanych właściwościach fotofizycznych.</p>	<p>Planned contribution to the development of the discipline</p> <p>The project will contribute to the development of organic and physical chemistry by advancing the understanding of keto–enol tautomerism in six-membered heterocyclic systems containing nitrogen and oxygen atoms. The conducted studies will enable a systematic evaluation of the influence of substituents with varying electronic and steric properties on the position of the tautomeric equilibrium, allowing the formulation of general structure–property relationships for this class of compounds.</p> <p>A key aspect of the project is the investigation of proton transfer in the excited state, analyzed for both intramolecular and intermolecular mechanisms. The obtained results will expand current knowledge on the role of N and O heteroatoms and hydrogen-bonding interactions in excited-state photophysical processes.</p> <p>The combination of synthetic methods, spectroscopic techniques, and quantum-chemical calculations will provide new experimental data and their interpretation at the molecular level. The outcomes of the project will represent a valuable contribution to research on tautomeric equilibria and proton transfer dynamics and may serve as a foundation for further studies aimed at the rational design of compounds with controlled photophysical properties.</p>
<p>Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata</p>	<p>Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate</p>

<ol style="list-style-type: none">1. Doświadczenie w syntezie organicznej i prowadzeniu badań spektroskopowych, w tym:<ul style="list-style-type: none">- w oczyszczaniu związków (chromatografia, krystalizacja itp.),- charakteryzacji strukturalnej związków organicznych,- umiejętność obsługi i interpretacji danych z technik spektroskopowych, takich jak: NMR (^1H, ^{13}C, ewentualnie 2D), UV-Vis, spektroskopia fluorescencyjna, IR.2. Samodzielność w planowaniu i realizacji badań naukowych.3. Umiejętność krytycznej analizy literatury naukowej w języku angielskim.4. Gotowość do pracy interdyscyplinarnej, łączącej chemię organiczną, fizyczną i obliczeniową.	<ol style="list-style-type: none">1. Experience in organic synthesis and spectroscopic studies, including:<ul style="list-style-type: none">- purification of compounds (chromatography, crystallization, etc.),- structural characterization of organic compounds,- ability to use and interpret data from spectroscopic techniques such as NMR (^1H, ^{13}C, optionally 2D), UV-Vis, fluorescence spectroscopy, and IR.2. Independence in planning and implementing research.3. Ability to critically analyze scientific literature in English.4. Willingness to work in interdisciplinary settings, combining organic, physical, and computational chemistry.
---	---