

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 3</p>	<p>Chemical sciences topic No. 3</p>
<p>Kataliza wahadłowa wiązania CO w transformacji kwasów karboksylowych</p>	<p>CO shuttle Catalysis for Carboxylic Acids Transformation</p>
<p>PhD supervisor: dr hab. inż. Jacek Nycz prof. UŚ https://us.edu.pl/instytut/ich/dzialalnosc-naukowa/badacze-indywidualni/jacek-nycz</p>	
<p>Krótką charakterystyką założeń i celów badawczych</p> <p>Kwasy karboksylowe są szeroko rozpowszechnionym elementem strukturalnym związków naturalnych i syntetycznych. Przykładem jest kwas oleinowy, występujący w postaci glicerydów, w tłuszczach i olejach zwierzęcych oraz roślinnych, a także niezbędne dla organizmów żywych aminokwasy. Kwasy karboksylowe stanowią również znaczącą klasę związków o zastosowaniu farmaceutycznym. Statystyki wskazują, że struktury molekularne ponad 450 leków sprzedawanych na całym świecie zawierają grupy karboksylowe. Ponadto kwasy karboksylowe służą jako bloki budulcowe w syntezie makrocząsteczek, takich jak np. włókna nylonowe. Badanie transformacji grup karboksylowych ma ogromne znaczenie naukowe i praktyczną wartość dla przygotowania wysokowartościowych chemikaliów ze zwykłych, powszechnie dostępnych kwasów karboksylowych lub poprzez modyfikację bardziej sfunkcjonalizowanych układów np. leków zawierających grupę/grupy karboksylowe. Może również stanowić punkt odniesienia dla degradacji na drodze chemicznej i ponownego wykorzystania makrocząsteczek (przede wszystkim tworzyw sztucznych), ułatwiając rozwiązanie coraz poważniejszego problemu zanieczyszczenia odpadami z tworzyw sztucznych i przyczyniając się do osiągnięcia celów neutralności węglowej. Reakcje karbonylowania, których opisy pojawiły się końcem XIX wieku (reakcja Gattermanna-Kocha 1897), są jedną z najskuteczniejszych metod syntezy związków karbonylowych w nowoczesnej syntezie organicznej. W tego typu reakcjach chemicznych często wykorzystywany jest tlenek węgla jako źródło</p>	<p>Brief description of research assumptions and goals</p> <p>Carboxylic acids are widely present in various natural and synthetically - functional molecules. For instance, oleic acid, in the form of glycerides, is abundant in animal and plant fats and oils, and amino acids are essential for living organisms. Carboxylic acids also represent a significant class of compounds with pharmaceutical applications. Incomplete statistics indicate that the molecular structures of over 450 marketed drugs worldwide contain carboxyl groups. Additionally, carboxylic acids are common chemical products and serve as building blocks for macromolecules such as nylon fibers. Therefore, the study of carboxyl group transformation is of great scientific significance and practical value for the preparation of fine chemicals from common carboxylic acids and the late-stage modification of functional molecules such as carboxylic acid drugs. It can also provide a reference for the chemical degradation and reuse of plastic macromolecules like nylon fibers, addressing the increasingly severe problem of plastic waste pollution and contributing to the achievement of carbon neutrality goals. Carbonylation reactions, which emerged in 1897 (Gattermann-Koch reaction), are one of the most effective methods for synthesizing carbonyl chemicals in modern organic synthesis. These chemical reactions often utilize carbon monoxide gas as the carbonyl source and organohalides (halocarbons) as electrophilic reagents. However, carbon monoxide gas is highly toxic, colorless, and odorless, with a wide explosive limit range, making it unsafe and difficult to handle. Additionally, the need for presynthesis of these organohalide electrophilic reagents reduces the</p>

<p>karbonylu i halogenki organiczne jako odczynniki elektrofilowe. Tlenek węgla jest jednak gazem wysoce toksycznym, bezbarwnym i bezwonny, o szerokim zakresie granic wybuchowości, co czyni go niebezpiecznym i trudnym w użyciu. Dodatkowo, potrzeba wstępnej syntezy elektrofilowych odczynników halogenoorganicznych wpływa na ekonomię poszczególnych etapów obniżając efektywność atomową całego procesu, co przekłada się na zmniejszenie wydajności syntezy. Opracowanie bezpiecznych sposobów wprowadzania grup karbonylowych i fragmentów alkilowych w celu wydajnej syntezy odpowiednich karbonylowych związków chemicznych zrewolucjonizuje tradycyjne podejście do reakcji karbonylacji i związane z nimi rynki przemysłowe, mając ogromne znaczenie naukowe i ekonomiczne. Uważamy, że zastosowanie katalizy wahańowej wiązania CO w transformacji kwasów karboksylowych katalizowanych metalami przejściowymi umożliwi odkrycie nowych sposobów transformacji kwasów karboksylowych. W reakcjach karbonylacji kwasy karboksylowe zastąpią halogenki organiczne i wysoce toksyczny tlenek węgla. Możliwe będzie opracowanie szeregu wydajnych i ekologicznych metod syntezy związków karbonylowych, rozwiązujących problemy napotymane w klasycznych reakcjach karbonylacji, takie jak trudności operacyjne i niska wydajność syntezy. Przyniesie to rewolucyjną zmianę w reakcjach karbonylacji i związanych z nimi rynkach przemysłowych.</p>	<p>step-economy and overall atomeconomy of the target compound synthesis, leading to decreased synthetic efficiency. Developing safe carbonyl and alkyl sources for carbonylation reactions to synthesize corresponding carbonyl chemicals efficiently will revolutionize traditional carbonylation reactions and the associated industrial markets, holding great scientific significance and economic value. This project aims to achieve the CO shuttle carbonylation of carboxylic acids via transition metal catalysis. If this application is funded, we firmly believe that the mechanisms of transition-metalcatalyzed carbonylation reactions involving the CO shuttle of carboxylic acids can be revealed. A new mode of carboxylic acid transformation can be developed in which carboxylic acids replace organohalides and highly toxic carbon monoxide gas in carbonylation reactions. A series of efficient and green methods for the synthesis of carbonyl-functional compounds can be developed, solving the problems encountered in the synthesis of carbonyl chemicals via classic carbonylation reactions, such as operational difficulties and low synthetic efficiency. This will bring a revolutionary change to carbonylation reactions and the corresponding industrial markets.</p>
<p>Planowany wkład w rozwój dyscypliny Podczas realizacji projektu dążymy do wyjaśnienia mechanizmu katalizowanych przez metale przejściowe (Ni, Pd itp.) reakcji transferu CO (tzw. CO shuttle) z udziałem kwasów karboksylowych. Opracujemy serię reakcji karbonylowania kwasów karboksylowych katalizowanych przez metale przejściowe z udziałem związków nienasyconych (olefin, alkinów itp.) oraz nukleofilów (olefin, alkinów terminalnych, związków typu sp^2C-H, takich jak benzoksazole, odczynniki aryloborowe itp.), realizując cel polegający na wykorzystaniu łatwo dostępnych kwasów karboksylowych zamiast halogenków organicznych (R-X) oraz gazowego CO w klasycznych reakcjach karbonylowania. Pozwoli to na wydajną syntezę szerokiej gamy cennych liniowych i cyklicznych związków karbonylowych, znacząco poszerzając zakres zastosowań kwasów karboksylowych w syntezie organicznej. Uzyskane</p>	<p>Planned contribution to the development of the discipline During the project, we aim to clarify the mechanism of transition metal (Ni, Pd, etc.)-catalyzed CO shuttle reactions of carboxylic acids. We'll develop a series of transition metal-catalyzed carbonylation reactions of carboxylic acids with unsaturated compounds (olefins, alkynes, etc.) and nucleophiles (olefins, terminal alkynes, sp^2C-H compounds like benzoxazoles, aryl boron reagents, etc.), achieving the goal to use the readily available carboxylic acids instead of organic halides (R-X) and CO gas in the classic carbonylation reactions. This will efficiently produce a wide range of valuable linear and cyclic carbonyl compounds, greatly expanding the application scope of carboxylic acids in organic synthesis. Our findings may reform the classic carbonylation reactions and related industries, offering key tech support and theory for the late-</p>

<p>wyniki mogą doprowadzić do przeformułowania klasycznych reakcji karbonylowania oraz powiązanych gałęzi przemysłu, oferując kluczowe wsparcie technologiczne i teoretyczne dla późnoetapowych modyfikacji leków opartych na kwasach karboksylowych oraz kontrolowanej degradacji polimerów, takich jak nylon.</p>	<p>stage modifications of carboxylic acid-based drugs and artificial degradation of polymers like nylon.</p>
<p>Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata Candidate should possess a M.Sc. degree in Chemistry or Chemical Technology and a knowledge of organic synthesis, with attention to synthesizing organophosphorous compounds. Additionally, the candidate should be familiar with the basic techniques used in the organic laboratory, i.e., NMR, thin layer chromatography, HPLC, purification of organic compounds, etc.</p>	<p>Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate Candidate should possess a M.Sc. degree in Chemistry or Chemical Technology and a knowledge of organic synthesis, with attention to synthesizing organophosphorous compounds. Additionally, the candidate should be familiar with the basic techniques used in the organic laboratory, i.e., NMR, thin layer chromatography, HPLC, purification of organic compounds, etc.</p>