

Магистърска програма
„Съвременни методи за синтез
и анализ на органични
съединения“

Задължителни дисциплини:

Съвременни методи на органичния синтез

Структурен анализ на органични съединения

Съвременни хроматографски методи за анализ

Органометална химия – хомогенен преходнометален катализ

Стереоселективен и асиметричен синтез

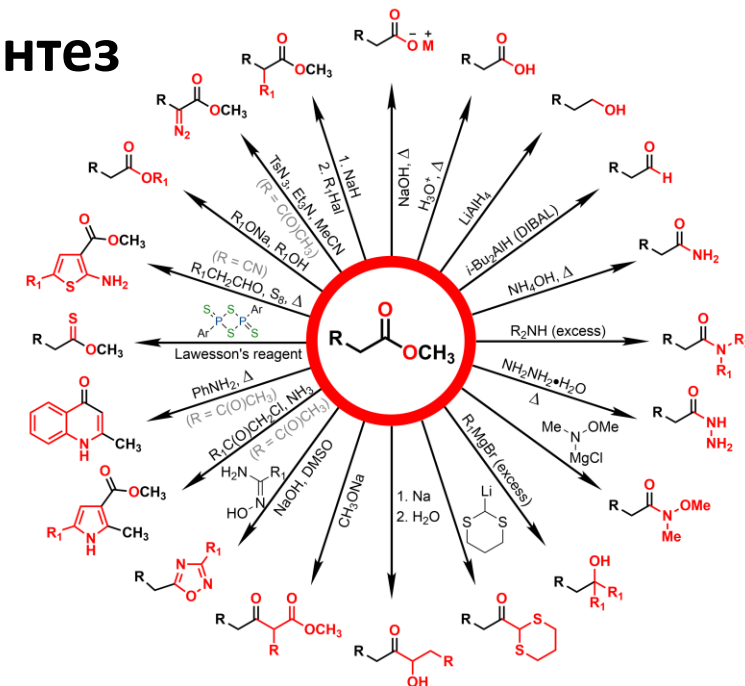
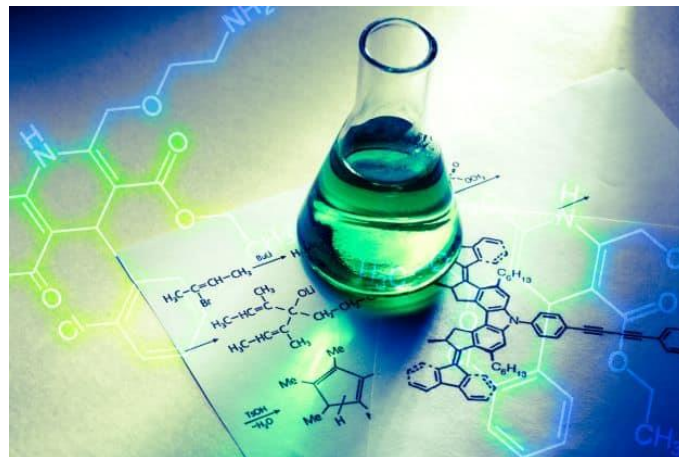
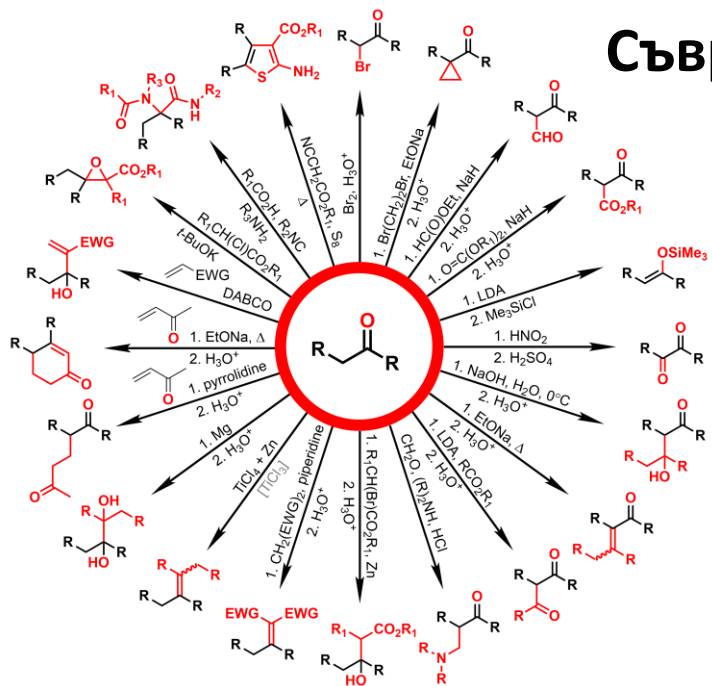
Биотрансформации на органичните съединения

Структура и реакционна способност на органични съединения

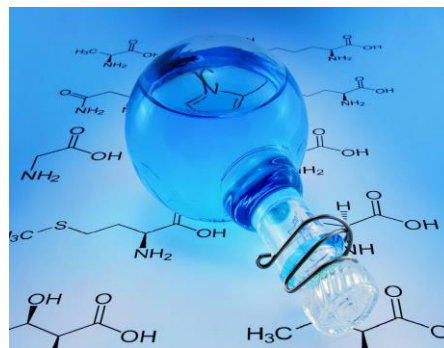
Квантовохимично моделиране на органични системи

Съвременни методи на органичния синтез

доц. д-р Юлиан Загранярски



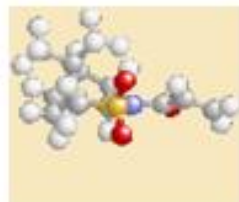
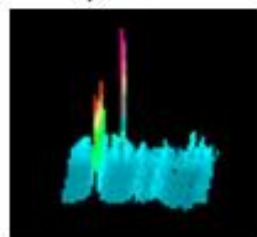
- Защитни групи в органичния синтез
- Трансформации на функционалните групи
- Именни реакции
- Метал-катализираны реакции
- Регио- и стереоселективен котрол на реакциите
- Ретросинтетичен анализ



- ❖ Реакция на *Mitsunobu*
- ❖ Реакция на *Diels–Alder*
- ❖ Реакция на *Ullmann*
- ❖ Реакция на *Sandmeyer*
- ❖ Реакция на *Cadogan*
- ❖ Реакция на *Wittig*
- ❖ Реакция на *Scholl*

Структурен анализ на органични съединения

чл.-кор. проф. дн Вася Банкова



Целта на настоящия курс е **да се усвоят умения** за ефективното интерпретиране на спектрална информация за потвърждаване и/или установяване на структурата на органични молекули.



Съвременни хроматографски методи за анализ

доц. д-р Христо Чанев



Основни насоки на развитие в хроматографските техники. Новости в апаратурното усъвършенстване на хроматографските методи:

- ✓ Високоэффективна течна хроматография
- ✓ Йонна хроматография
- ✓ Газова хроматография
- ✓ Статичен и динамичен „хед спейс“
- ✓ Дву-дименсионални техники в газовата хроматография

Хроматография и маспектрометрия:

- ✓ Газова хроматография/маспектрометрия
- ✓ Високоэффективна течна хроматография/маспектрометрия
- ✓ Приложения на последователно свързани техники.

Приложни анализи:

- ✓ Анализи, свързани с опазване на околната среда
- ✓ Анализ на храни, напитки и хранителни добавки
- ✓ Анализ на лекарствени препарати
- ✓ Приложение на хроматографията във фитохимията

Преходнометален катализ – защо, кога, как?

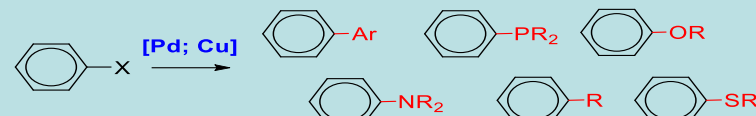
Органични реакции, които протичат върху метален център L_nM

L - лиганд; M – метален атом

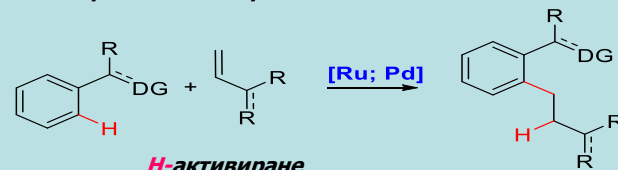
! при трудни или невъзможни за класическата ОХ превръщания:

-- лиганди:

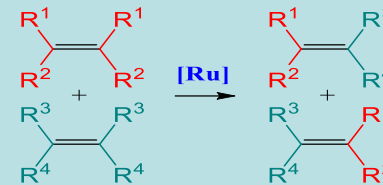
карбени, фосфини, амини, алкохоли, етери, карбонилни съединения, алкени.



Кръстосано свързване



H-активиране



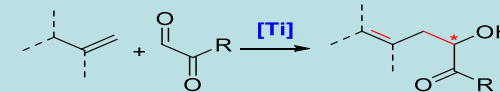
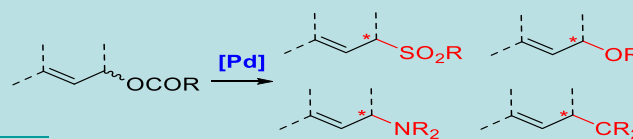
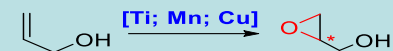
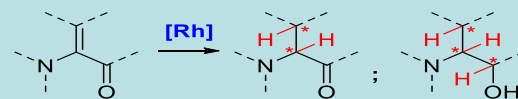
Олефинова метатеза

! за прецизен стереоконтрол:

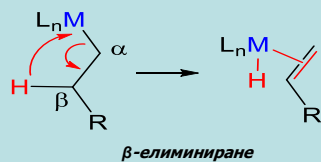
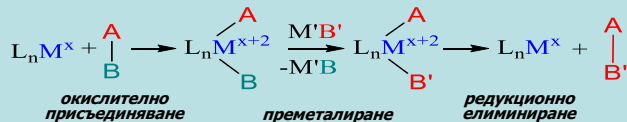
-- хирални лиганди:

карбени, фосфини, амини, алкохоли, етери, карбонилни съединения.

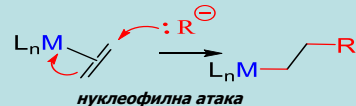
няма универсален лиганд, следователно няма и универсален катализатор!



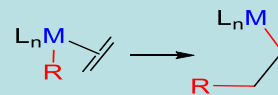
- някои основни процеси върху метален център, които са и части от механизми:



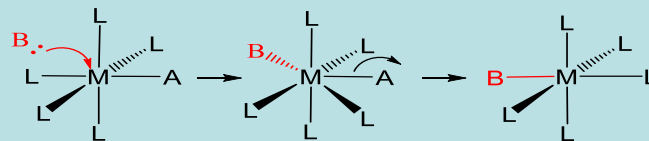
β-елиминиране



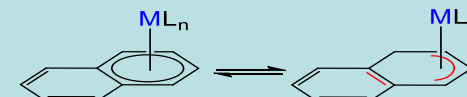
нуклеofilна атака



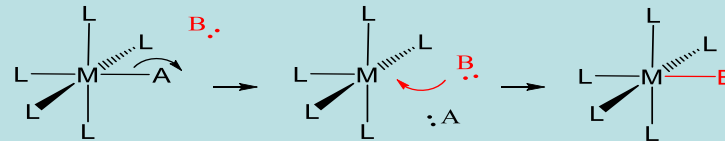
миграционно вмъкване



асоциативно



"приплъзване" на лиганд



дисоциативно

лигандно заместване

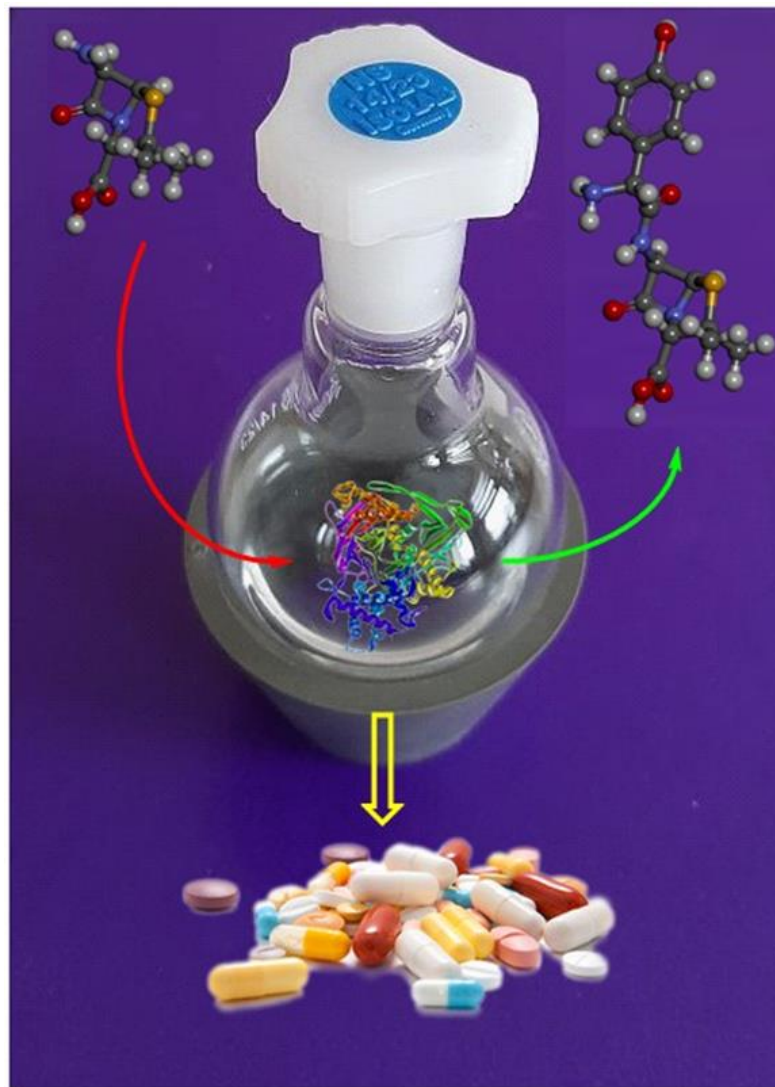
Биотрансформации на органични съединения

доц. д-р Донка Ташева

Разглеждат се съвременните възможности на биологичните подходи (използване на биокатализатори и клетки) за решаване на различни синтетични проблеми.

Биотрансформациите се използват в случаите, когато конвенционалните химични подходи са изчерпали потенциала си или като алтернатива с цел намаляване на етапите на синтеза, избягване на вредни за здравето и околната среда химични реагенти и разтворители, както и за по-ниски енергийни разходи.

Комбинирането на химични методи с биотрансформациите в синтетичната практика на известни или нови биологично активни продукти, е перспективна и динамично развиваща се област, намираща широко приложение в производството на фармацевтични субстанции и в биотехнологични производства.



Предимства на ензимите в синтеза:

- Те са високоефективни катализатори;
- Действат при меки условия;
- Проявяват висока хемоселективност, региоселективност, енантиселективност и диастереоселективност;
- Не са ограничени до естествените си субстрати;
- Могат да работят в неводна среда.

Структура и реакционна способност на органични съединения

доц. д-р Донка Ташева

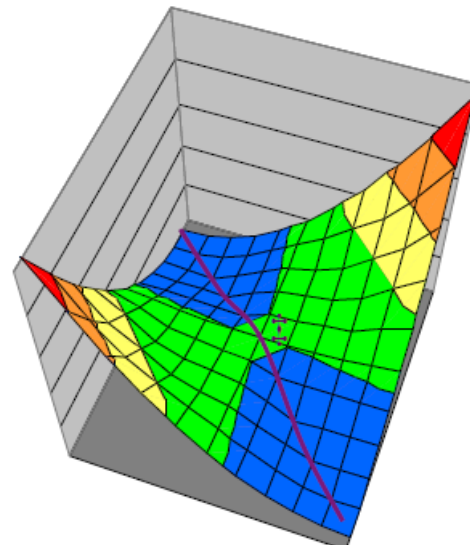
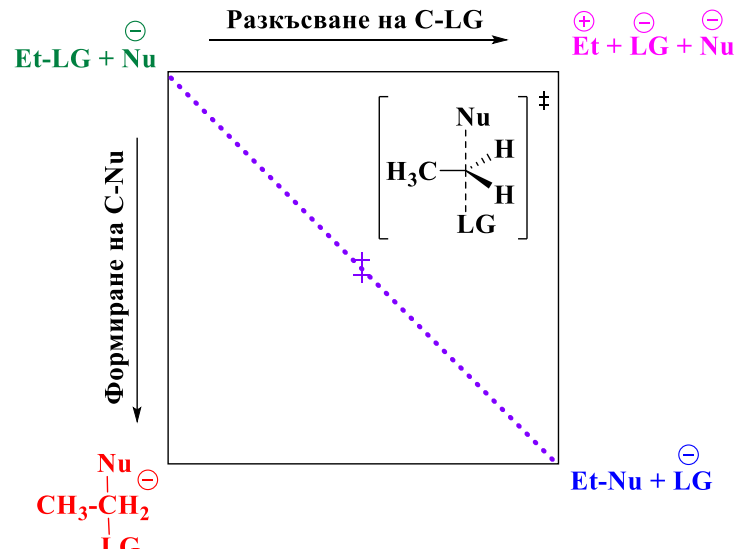
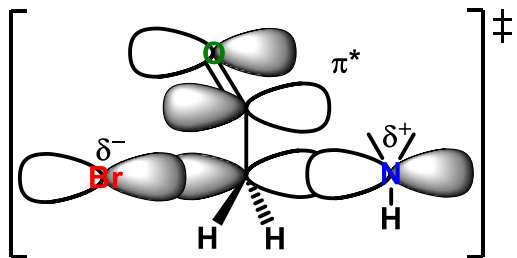
Разглеждат се връзката между структура и реакционна способност на органичните съединения.

Обсъждат се механизмите на най-важните видове органични реакции:

- заместване;
- присъединяване;
- елиминиране.

Разглеждат се:

- реакции с участието на радикали;
- перициклени реакции.



- Използват се диаграми на О'Ferrall за обсъждане на структурните ефекти върху геометрията на преходното състояние.
- Използват се данни за кинетични изотопни ефекти.
- Изучават се стереоелектронни ефекти при различни реакции.

Познаването на механизмите на отделните реакции е най-добрият начин за управляването на реакциите и дава възможност за ефективно провеждане на разнообразни синтези на органични съединения и достигане на високи добиви.

Квантовохимично моделиране на органични системи

✓ Цел на курса:

- ✓ Запознаване с методите на съвременната изчислителна химия и тяхното практическо приложение в органичната химия.

✓ Придобити умения в края на курса:

- ✓ Отчитане влиянието на разтворителя при моделиране на химични реакции,
- ✓ Търсене на локални минимума и преходни състояния при изследване на механизми на органични реакции,
- ✓ Индекси на реакционна способност,
- ✓ Симулиране на ИЧ, УВ, ЯМР спектри и анализ на получените резултати,
- ✓ Работа с квантовохимичен софтуер на многопроцесорен компютърен клъстер.

✓ Лектори:

- ✓ проф. д-р Петко Петков, проф. д-р Християн Александров, проф. дхн Георги Вайсилов

