

Projekt 2.5. Projektowanie wysoce selektywnych katalizatorów przy użyciu Sztucznej Inteligencji.

Promotor: Prof. Dr. Bartosz Grzybowski

Instytut: Instytut Chemii Organicznej PAN

Jednostka organizacyjna: Zespół XI

WWW: www.icho.edu.pl, FACEBOOK: The Grzybowski Group,

Email: nanogrzybowski@gmail.com

Opis: Doktorant/ka będzie prowadzić badania na pograniczu chemii organicznej, samoorganizacji molekularnej i sztucznej inteligencji celem syntezy i charakteryzacji unikatowych katalizatorów umożliwiających wysoce selektywne reakcje na szkieletach cząsteczek organicznych. Badania te łączyć będą ze sobą klasyczną syntezą organiczną i katalizę z najnowocześniejszymi technikami charakteryzacji nanomateriałów, jak również z elementami sztucznej inteligencji. Doktorant będzie miał możliwość pracy z chemikami o wybitnych kwalifikacjach i wyjątkowym zapale, z twórcami stworzonego przez nasz zespół oprogramowania do planowania syntez Chematica/Synthia™ (prosimy sprawdzić w Googlu!), wszystko pod kierownictwem laureata Nagrody Feynmana, nagród ACS, RSC, itd., Prof. Bartosza Grzybowskiego (<https://scholar.google.com/citations?user=hjS0xZOAAA&hl=en&oi=ao>). Chętni będą mogli poszerzać swoje kwalifikacje poprzez ścisłą współpracę z i krótkie staże w koreańskich laboratoriach Prof. Grzybowskiego (<https://www.ibs.re.kr/softmatt/>), jak również uczestniczyć w wielu naszych współpracach z czołowymi firmami farmaceutycznymi świata.

Cel: Czy zastanawiałeś/aś się kiedyś co pozwala enzymom na selektywność tak wręcz niewiarygodną, że spośród setek np. amidowych wiązań są w stanie przeciąć lub połączyć tylko pomiędzy dwoma specyficznymi aminokwasami? Dlaczego nie jesteśmy w stanie osiągnąć podobnej selektywności w katalizatorach tworzonych przez człowieka? Czy jest w ogóle możliwe, żeby stworzyć w laboratorium, kompletnie od podstaw nie-aminokwasowe katalizatory o parametrach dorównujących enzymom? Czy takie „sztuczne enzymy” mogłyby się same „złożyć” z małych cząsteczek? Czy jest możliwe jakoś przewidzieć i pokierować taką samoorganizacją? Na tego rodzaju właśnie pytania staramy się odpowiadać w naszej pracy w ramach prestiżowego grantu Maestro. W tym celu łączymy klasyczne metody syntezy organicznej i organometalicznej z elementami nanotechnologii jak i technikami sztucznej inteligencji, SI, która pozwala nam przewidzieć właściwości naszych samoorganizujących się, wysokoselektywnych katalizatorów. Za pomocą SI nie „zgadujemy” docelowych konformacji, lecz wręcz ewoluujemy je na komputerach a dopiero potem syntezujemy – co więcej, ten cykl naprawdę działa a nasze katalizatory osiągają selektywności, dla pozornie równocennych wiązań, mierzone w setkach. Pracując z nami, nie będziesz się kształcił/a na specjalistę od SI, ale odkryjesz jak niewyobrażalne możliwości daje połączenie syntezy z mocą inteligentnych maszyn! Zwieńczeniem tej pracy będą „nanozymy” nie tylko wyjątkowo selektywne, lecz również dużo trwalsze niż biologiczne enzymy, potrafiące funkcjonować w rozpuszczalnikach organicznych i w wysokich temperaturach. Z pomocą tych unikatowych konstruktów, będziesz mógł/mogła, na przykład, wprowadzić unikatowe „late-stage” funkcjonalizacje szkieletów o potencjalnych właściwościach farmaceutycznych (to m.in. dlatego naszymi badaniami tak interesują się główni gracze światowej farmacji). Jeśli ta wizja – już w dużej części przekuta w laboratoryjną rzeczywistość -- przemawia do Twojej wyobraźni, po prostu napisz. Nasz zespół jest zawsze otwarty na mądre głowy i na wizjonerskie rozmowy!

Wymagania: Znajomość chemii i duży zapał do wielkich odkryć naukowych, chęć publikowania w Nature i Science.