

Projekt 2.4 Asymetryczna redukcja prochiralnych ketonów – projektowanie nowych katalizatorów z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji.

Promotor: prof. dr hab. Jacek Młynarski

Instytut: Chemii Organicznej

www: <https://www.icho.edu.pl/zespol/jacek-mlynarski/>

Opis:

Analiza danych zebranych w naszym zespole i analiza danych literaturowych. Synteza katalizatorów. Przeprowadzanie reakcji katalitycznych z kompleksami cynku i magnezu oraz odkrywanie nowych reakcji katalitycznych w oparciu o analizę danych AI. Przygotowanie raportów i manuskryptów.

Cel projektu:

Celem planowanych badań jest wspomagane sztuczną inteligencją projektowanie, a następnie eksperymentalne weryfikowanie nowych chiralnych kwasów Lewisa zawierających jony cynku i magnezu jako katalizatorów w wybranych reakcjach organicznych, w szczególności w reakcjach asymetrycznej redukcji grupy karbonylowej. Wspomagane komputerowo projektowanie katalizatorów będzie wymagało analizy danych zebranych w naszym zespole w czasie wieloletniej pracy w obszarze syntezy asymetrycznej oraz analizy danych literaturowych. Celem badań jest również implementacja pokażnej bazy danych wyników (zarówno pozytywnych jak i negatywnych) uzyskanej w toku poprzednich badań do rozwiązania napotkanych wówczas problemów.

Wymagania:

- Uzyskany tytuł magistra chemii,
- doświadczenie w syntezie organicznej i interpretacji danych spektralnych,
- dobra znajomość języka angielskiego