

Projekt 2.1 Autonomiczne odkrywanie, rozwój i optymalizacja reakcji organokatalitycznych z wykorzystaniem inteligentnych robotów chemicznych

Promotor: prof. Janusz Jurczak / dr Jarosław Granda

Instytut: Instytut Chemii Organicznej PAN

Jednostka organizacyjna: Zespół VIIIb

www: <https://www.icho.edu.pl/zespol/janusz-jurczak/jaroslaw-granda/>

Opis:

Chiralność odgrywa ważną rolę w przyrodzie, ponieważ cząsteczki o różnej chiralności mogą wykazywać skrajnie różne właściwości. Duża część katalizy chemicznej, a w szczególności katalizy organicznej, poświęcona jest selektywnej syntezie chiralnych cząsteczek. Jednakże, pomimo ogromnego postępu, jaki dokonał się w ostatnich dekadach, wciąż daleko nam do możliwości wydajnego zaprojektowania syntezy dowolnej chiralnej cząsteczki. Zazwyczaj opracowanie nowych metod (organo)katalitycznych wymaga rozległej i czasochłonnej optymalizacji, która zwykle jest wykonywana ręcznie. Dlatego potrzebne są nowe technologie wspomagające, które przyspieszą ten proces. Automatyzacja i robotyka zaczęły odgrywać ważną rolę w naukach chemicznych. Zastosowanie zautomatyzowanych metod może przyspieszyć proces badawczy, sprawić, że eksperymenty będą bardziej powtarzalne i uwolnić badaczy od powtarzalnych zadań, dzięki czemu będą mogli skupić się na projektowaniu nowych reakcji chemicznych.

Cel projektu:

W tym projekcie zbadamy obszar organokatalizy z wykorzystaniem automatyki i robotyki chemicznej, która ostatecznie będzie kierowana metodami sztucznej inteligencji. Wybrany kandydat będzie pracował nad kilkoma celami:

- projekt i budowa wysokoprzepustowej, zautomatyzowanej platformy robotycznej
- automatyczna optymalizacją wybranych reakcji
- autonomiczne poszukiwanie nowych transformacji za pomocą platformy robotycznej
- synteza materiałów wyjściowych, katalizatorów i bloków budulcowych
- mechanistyczne badanie wybranych transformacji oraz badanie ich zakresu i ograniczeń

Podczas realizacji projektu istnieje możliwość nabycia umiejętności w robotyce chemicznej, które są niezbędne w przemyśle farmaceutycznym i chemicznym.

Wymagania:

- ukończone studia magisterskie z zakresu chemii,
- umiejętność analitycznego, metodycznego rozwiązywania problemów oraz logicznego, obiektywnego myślenia,
- dobra znajomość chemii i syntezy organicznej,
- znajomość języka angielskiego w stopniu umożliwiającym prowadzenie samodzielnych badań naukowych,
- mile widziana jest jakakolwiek umiejętność programowania i/lub doświadczenie w projektach DIY.