

## **Projekt 2.2 Cynk zamiast metali szlachetnych – projektowanie nowych katalizatorów z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji**

**Promotor:** prof. dr hab. Jacek Młynarski

**Instytut:** Instytut Chemii Organicznej PAN

**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 oraz odkrywanie nowych reakcji katalitycznych w oparciu o analizę danych AI. Przygotowanie raportów i manuskryptów.

### **Cel projektu:**

Celem planowanych badań jest wspomaganie sztuczną inteligencją projektowanie, a następnie eksperymentalne weryfikowanie nowych chiralnych kwasów Lewisa zawierających jony cynku 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