Projekt nr 3.2

Projektowanie i synteza selektywnych katalizatorów reakcji hydrocyjanowania wspomagane metodami uczenia maszynowego

Promotor / promotor pomocniczy

prof. dr hab. Volodymyr Sashuk / dr Dawid Lichosyt

Zespół IChF PAN

Zespół 7. Chemia w ograniczonej geometrii / Research group No. 7. Chemistry in Confined Spaces - prof. dr hab. Volodymyr Sashuk
www: https://lichosytlab.com/

Opis

Hydrocyanowanie alkenów i alkinów stanowi kluczową metodę syntezy nitryli – związków szeroko stosowanych jako substancje czynne w farmaceutykach i agrochemikaliach, a także jako materiały funkcjonalne oraz uniwersalne intermediaty w syntezie organicznej. Tradycyjnie hydrocyanowanie opiera się na wykorzystaniu katalizatorów niklowych z symetrycznymi ligandami fosfinowymi, które często nie zapewniają wystarczającej kontroli regio- i stereoselektywności dla niesymetrycznych substratów. W konsekwencji powstają mieszaniny izomerycznych produktów, co obniża ekonomię atomową, zwiększa koszty oczyszczania i ogranicza praktyczne zastosowanie tego procesu. Racjonalne projektowanie katalizatorów hydrocyanowania jest utrudnione przez wielowymiarowe zależności pomiędzy budową katalizatora, warunkami reakcji i strukturą substratów. Najnowsze osiągnięcia w dziedzinie uczenia maszynowego dostarczają jednak zaawansowanych narzędzi do analizy zależności struktura–aktywność–selektywność z odpowiednio zebranych zbiorów danych eksperymentalnych oraz do ukierunkowanego przeszukiwania rozległych przestrzeni chemicznych. Połączenie systematycznego projektowania i syntezy zdesymetryzowanych ligandów z modelowaniem opartym na danych stwarza możliwość odejścia od empirycznej optymalizacji na rzecz predykcyjnego projektowania wysoko selektywnych katalizatorów hydrocyanowania.

Cel projektu

Celem projektu jest opracowanie holistycznej strategii kontroli selektywności reakcji hydrocyjanowania poprzez połączenie systematycznych badań zróżnicowanej biblioteki zdesymetryzowanych katalizatorów z modelami uczenia maszynowego, które będą przewidywać optymalne kombinacje katalizator–substrat–warunki oraz umożliwią wirtualne (in silico) projektowania nowych, wysoce selektywnych katalizatorów.

Wymagania wobec kandydatów

Wymagany jest tytuł magistra chemii (lub w dyscyplinie pokrewnej) oraz duże zainteresowanie syntezą chemiczną i katalizą, a także wykorzystaniem metod uczenia maszynowego w chemii. Oczekuje się wysokiej motywacji do pracy naukowej, gotowości do samodzielnego rozwiązywania problemów badawczych, umiejętności pracy w zespole oraz systematyczności i rzetelności w prowadzeniu eksperymentów. Mile widziane będzie doświadczenie w syntezie organicznej lub chemii koordynacyjnej, podstawowa znajomość narzędzi obliczeniowych / programowania (np. Python) oraz dobra znajomość języka angielskiego umożliwiająca korzystanie z literatury naukowej.

Stypendium/Wynagrodzenie doktoranta z grantów

Stypendium finansowane w ramach projektu "Inteligentna Inżynieria Katalizatorów Reakcji Hydrofunkcjonalizacji: Od Kontroli Selektywności do Modelu Predykcyjnego" nr FENG.02.02-IP.05-0063/25 finansowanego z 2. Priorytetu Programu Fundusze Europejskie dla

Nowoczesnej Gospodarki 2021–2027 (FENG) Działanie 2.2 FIRST TEAM, Instytucja Pośrednicząca: Fundacja na rzecz Nauki Polskiej.

Ostateczna kwalifikacja do Szkoły doktorskiej będzie zależna od wyniku uzyskanego w rekrutacji prowadzonej do projektu badawczego FIRST TEAM nr FENG.02.02-IP.05-0063/25 (niezbędne jest odrębne zgłoszenie na rekrutację, która będzie prowadzona w ramach projektu).