

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej
w dyscyplinie nauki chemiczne
w Jednostce: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN**

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Prof. dr hab. Maciej Szaleniec, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, Niezapominajek 8. 30-239 Kraków maciej.szaleniec@ikifp.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p>Wolframowa oksydoreduktaza aldehydów/hydrogenaza – modelowanie mechanizmu reakcji enzymatycznej, badania strukturalne i spektroskopowe</p> <p>Celem projektu jest dogłębne poznanie oksydoreduktazy aldehydowej z <i>Aromatoleum aromaticum</i> (AOR), enzymu należącego do klasy enzymów W-AOR, który jest odpowiedzialny za detoksykację bakterii z toksycznych aldehydów. AOR nie tylko katalizuje utlenianie szerokiej gamy aldehydów jednocześnie redukując NAD^+, ale również okazał się nową hydrogenazą, zdolną do utleniania wodoru i redukcji kwasów karboksylowych oraz redukcji NAD^+ do NADH. Fakt ten czyni enzym interesującym nie tylko ze względów naukowych, ale również ze względu na potencjalne zastosowania w przemyśle biotechnologicznym.</p> <p>Projekt będzie koncentrował się na wyjaśnieniu podstaw mechanizmu reakcji poprzez prowadzenie symulacji dynamiki molekularnej i obliczeń QM:MM mechanizmu reakcji oraz badania strukturalne (wysokorozdzielcze cryo-EM, próby wykrywania białka i rozwiązania struktury metodami rentenograficznymi) i spektroskopowe badania kofaktora (EPR, EXAFS). Projekt będzie realizowany w kooperacji z dr Janem Schullerem z centrum Synmikro Uniwersytetu Marburskiego (cryo-EM, XRD), prof. Grahamem N. Georgem z Uniwersytetu Saskatchewan w Kanadzie (EXAFS) oraz prof.</p>

		<p>Marcinem Sarewiczem z WBBiB UJ w Krakowie (EPR)</p> <p>Planowane jest przynajmniej 1 miesięczny pobyt doktorata(ki) w Marburgu w grupie dr Jana Schullera oraz miesięczny pobyt w Kanadzie w grupie prof. Grahama N. Georga.</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<p>Magisterium z chemii, chemii biologicznej, biochemii, biotechnologii, biofizyki lub fizyki; dobrze będzie widziane wcześniejsze doświadczenie w technikach modelowania molekularnego lub metod krystalograficznych</p> <p>międzynarodowego charakteru projektu wymagana jest gotowość do mobilności międzynarodowej oraz dobra znajomość języka angielskiego</p>
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Opus 26 (projekt złożony);

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	<p>Prof. Maciej Szaleniec, Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry</p> <p>Niezapominajek 8. 30-239 Kraków</p> <p>maciej.szaleniec@ikifp.edu.pl</p>
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
3	<p>Research subject</p> <p>Title</p> <p>Short description, up to 250 words</p>	<p>Tungsten Aldehyde Oxidoreductase/Hydrogenase – modelling of the mechanism of the enzymatic reaction, structural and spectroscopic studies</p> <p>The aim of the project is to thoroughly study of aldehyde oxidoreductase (AOR) from <i>Aromatoleum aromaticum</i>, an enzyme of the W-AOR class which is responsible for the detoxication of bacterial cells from toxic aldehydes. However, AOR is not only able to catalyse the oxidation of a wide range of aldehyde coupled to the reduction of NAD⁺. AOR turned out to be a new hydrogenase able to catalyze H₂-dependent reduction of carboxylic acid or NAD⁺ to NADH. This fact makes the enzyme not only very interesting but also valuable for the biotechnological industry.</p> <p>The project will focus on fundamental studies of the enzyme reaction mechanism by means of MD simulation and QMMM modelling as well as structural studies of the enzyme (with high-resolution cryo-EM or enzyme crystallization followed</p>

		by XRD) and spectroscopic studies of the enzyme tungsten cofactor (EPR, EXAFS). The project will be conducted in cooperation with dr Jan Schuller from Synmikro center of Marburg University (cryo-EM, protein crystallography), prof. Graham N. George (University of Saskatchewan, Canada) and Prof Marcin Sarewicz (FBBB JU in Kraków).
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	MSc in chemistry, biological chemistry, biochemistry, biotechnology, biophysics or physics, prior experience in molecular modelling or crystallography will be an advantage; due to the cooperative nature of the project international mobility is also required as well as good skill in English
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	OPUS 26 (submitted)