

**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><b>Wolframowa oksydoreduktaza aldehydów/hydrogenaza – modelowanie mechanizmu reakcji enzymatycznej, badania strukturalne i spektroskopowe</b></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 <math>\text{NAD}^+</math>, ale również okazał się nową hydrogenazą, zdolną do utleniania wodoru i redukcji kwasów karboksylowych oraz redukcji <math>\text{NAD}^+</math> 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 wykrystalizowania 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 2023/51/B/ST4/01224

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><b>Tungsten Aldehyde Oxidoreductase/Hydrogenase – modeling of the mechanism of the enzymatic reaction, structural and spectroscopic studies</b></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 that is responsible for the detoxication of bacterial cells from toxic aldehydes. However, AOR is not only able to catalyze the oxidation of a wide range of aldehydes coupled with the reduction of NAD<sup>+</sup>. AOR turned out to be a new hydrogenase able to catalyze the H<sub>2</sub>-dependent reduction of carboxylic acid or NAD<sup>+</sup> 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 QM:MM modelling as well as structural studies of the enzyme (with high-resolution cryo-EM or enzyme</p>

		crystallization followed 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, and 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 2023/51/B/ST4/01224