

**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	Tomasz Borowski, prof. dr hab. IKiFP PAN tomasz.borowski@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	Mechanizmy reakcji i przeprojektowywanie wybranych metaloenzymów – badania obliczeniowe. W projekcie tym planuje się wykonanie serii badań obliczeniowych z zastosowaniem: metod dynamiki molekularnej (MD), metod QM/MM oraz metod racjonalnego przeprojektowywania enzymów. Celem symulacji MD i badań QM/MM będzie poznanie na poziomie atomowym mechanizmów reakcji katalizowanych przez badane enzymy, natomiast przeprojektowanie enzymu będzie służyć weryfikacji proponowanego mechanizmu oraz otrzymaniu enzymu o nowej specyficzności reakcji.
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	Podstawowa znajomość metod obliczeniowych chemii / biochemii.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Środki statutowe IKiFP PAN, środki akcji COST (COZYME) – wymiana międzynarodowa.

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Tomasz Borowski, prof. dr hab. IKiFP PAN tomasz.borowski@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	Reaction mechanisms and redesign of selected metalloenzymes - computational studies. In this project, it is planned to perform a series of computational studies using: molecular dynamics (MD) methods, QM/MM methods and methods of rational enzyme redesign. The aim of MD simulations and QM/MM studies will be to understand at the atomic level the mechanisms of reactions catalyzed by the tested enzymes, while enzyme redesign will serve to verify the proposed mechanism and obtain an enzyme with new reaction specificity.
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	Basic knowledge of computational methods of chemistry / biochemistry.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	Statutory funds of ICSC PAS, COST action (COZYME) – international exchange.