

**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	Dr hab. inż. Piotr Batys, prof. IKIFP PAN Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk piotr.batys@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	Projektowanie i modelowanie samoorganizujących się systemów nośnikowych na bazie peptydów Peptydy stanowią istotną klasę układów miękkiej materii, których właściwości fizykochemiczne oraz zachowanie samoorganizujące mogą być regulowane poprzez kontrolę sekwencji aminokwasowej. Ich zdolność do tworzenia stabilnych, uporządkowanych agregatów oraz do wiązania wybranych cząsteczek sprawia, że są postrzegane jako perspektywiczne systemy nośnikowe w zastosowaniach biomateriałowych. Celem doktoratu jest teoretyczny opis, projektowanie oraz optymalizacja samoorganizujących się peptydów jako kontrolowanych systemów nośnikowych z wykorzystaniem klasycznych symulacji dynamiki molekularnej (MD) prowadzonych w środowisku GROMACS oraz przy użyciu infrastruktury obliczeniowej HPC. Badania obejmą analizę stabilności, organizacji supramolekularnej oraz mechanizmów agregacji peptydów. Szczególny nacisk zostanie położony na zrozumienie, w jaki sposób sekwencja peptydu umożliwia selektywne oddziaływania z wybranymi cząsteczkami modelowymi, ich transport wewnątrz struktur oraz uwalnianie

		pod wpływem czynników zewnętrznych, takich jak zmiana pH, temperatury lub siły jonowej. Realizacja doktoratu będzie obejmować również walidację eksperymentalną oraz przewiduje współpracę międzynarodową z wyspecjalizowanymi grupami badawczymi, co umożliwi wymianę wiedzy, konsultacje merytoryczne oraz porównanie wyników modelowania z danymi doświadczalnymi. Realizacja niniejszego tematu pozwoli na rozwój zasad projektowania funkcjonalnych układów peptydowych oraz może stanowić podstawę do przyszłych zastosowań w obszarze biomateriałów i inżynierii molekularnej.
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	- Dyplom ukończenia studiów magisterskich w dziedzinie chemii, fizyki, inżynierii materiałowej lub dziedzin pokrewnych. - Dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie. - Dodatkowymi atutami będzie doświadczenie w zastosowaniu metod modelowania molekularnego oraz mobilność międzynarodowa.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Środki statutowe IKiFP PAN

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Dr hab. inż. Piotr Batys, prof. IKiFP PAN Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences piotr.batys@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
3	Research subject title Short description, up to 250 words	Design and Molecular Modelling of Self-Assembled Peptide-Based Carrier Systems

		Peptides represent a significant class of soft-matter systems whose physicochemical properties and self-assembly behaviour can be regulated through amino-acid sequence control. Their ability to form stable, ordered assemblies and interact with selected molecules makes them attractive as potential carrier systems for biomaterial-related applications. The goal of this PhD work is the theoretical design, characterization and optimization of self-assembled peptide-based carrier systems using classical molecular-dynamics (MD) simulations performed in the GROMACS environment and supported by high-performance computing (HPC) resources. The research will include analysis of peptide stability, supramolecular organization and aggregation mechanisms, with particular emphasis on understanding how sequence-level control enables selective interaction with target model molecules, their transport within assemblies, and stimulus-responsive release triggered by external factors such as pH, temperature or ionic strength. The PhD work will also involve experimental validation and international collaboration with specialized research groups, enabling scientific exchange, expert consultation and comparison of modelling results with experimental observations. The outcomes of this research have the potential to advance the fundamental understanding of peptide-based functional systems and form a conceptual foundation for future applications in biomaterials and molecular engineering.
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	- MSc in chemistry, physics, materials science or related fields - Good knowledge of English – spoken and written - Experience in molecular modeling methods and international mobility will be a plus.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	Statutory funds of ICSC PAS



K R A K O W S K A
INTERDYSCYPLINARNA
SZKOŁA DOKTORSKA