

Enzymy to białka, które działają jak biologiczne katalizatory, przyspieszając reakcje chemiczne i są nieodzowną częścią każdego żywego organizmu. Bez enzymów prawie żadna reakcja chemiczna nie byłaby możliwa do przeprowadzenia.

Główną ideą tego projektu jest zbadanie stosunkowo nowej grupy złożonych układów chemicznych, które mogą działać jak sztuczne enzymy, katalizując wybrane reakcje chemiczne. Te nowe układy, zwane poliokso metalanami, mają zupełnie inną strukturę niż enzymy, ale są biokompatybilne i okazały się skutecznymi katalizatorami. Konkretnym celem tego projektu jest opracowanie metod obliczeniowych i modeli, opartych na chemii kwantowej, które pozwolą na badanie ich właściwości bez konieczności ich syntezy (przynajmniej w pierwszym etapie badań). Będzie to zarówno efektywne czasowo, jak i kosztowo podejście, które pozwoli na wstępną selekcję kandydatów na sztuczne enzymy i wybór do dalszych badań tylko tych o najlepszych przewidywanych właściwościach.

Proponowany projekt zapewni narzędzie do racjonalnego projektowania i badania różnych poliokso metalanów oraz przyczyni się do lepszego zrozumienia, jak racjonalnie projektować nowe klasy katalizatorów do określonych celów. Przyczyni się również do lepszego zrozumienia zależności struktura-aktywność dla poliokso metalanów, zwiększy naszą wiedzę na ich temat, a w przyszłości obiecuje stworzenie szybszych i bardziej wydajnych katalizatorów. Proponowane, kompleksowe, teoretyczne podejście do tego problemu zapewni nam dokładną charakterystykę nowych układów i doprowadzi do opracowania nowej metodologii racjonalnego projektowania nowych katalizatorów i sztucznych enzymów. Wierzimy, że projekt prowadzony przez eksperta w dziedzinie teoretycznego opisu układów katalitycznych jest aktualny i istotny dla polskiej nauki.