



ZESPÓŁ STOSOWANEJ CHEMII TEORETYCZNEJ I CHEMOINFORMATYKI

POLITECHNIKI WARSZAWSKIEJ

NAUKI CHEMICZNE

#CHEMIA OBLICZENIOWA #CHEMIA KWANTOWA
#TERMODYNAMIKA CHEMICZNA #MACHINE LEARNING
#QSPR #QSAR #CAMD

Zespół prowadzi badania w ramach Katedry Chemii Fizycznej Wydziału Chemicznego PW. Ich celem jest wykorzystanie metod chemii obliczeniowej (chemia kwantowa, termodynamika molekularna, chemoinformatyka) do opisu szerokiego spektrum właściwości fizykochemicznych materiałów oraz wspomaganego komputerowo projektowania różnego typu układów o zadanych właściwościach – Zespół skutecznie wspiera wszystkie zasady zielonej chemii.

Podejmowane przez Zespół obszary badawcze to:

- wspomagane komputerowo projektowanie rozpuszczalników (w tym alternatywnych, np. cieczy jonowych lub głębokich eutektyków) do zastosowań w procesach rozdzielania, np. ekstrakcji,
- modele QSPR/QSAR właściwości fizykochemicznych o potencjalnych zastosowaniach prognostycznych,
- termodynamika chemiczna – badanie nowoczesnych metod obliczeniowych, np. COSMO-RS i SAFT, jako narzędzi do modelowania właściwości istotnych z punktu widzenia technologii chemicznej (równowagi fazowe, funkcje nadmiarowe),
- wykorzystanie metod chemii teoretycznej do opisu efektu podstawnikowego; badania wpływu rozpuszczalnika na właściwości poszczególnych fragmentów cząsteczki (podstawnika, centrum reakcji i łączącego je transmitera).

INFRASTRUKTURA

KONTAKT

prof. dr hab. inż. Halina Szatyłowicz
halina.szatylowicz@pw.edu.pl
(+48) 22 234 77 55

INFRASTRUKTURA BADAWCZA

- oprogramowanie COSMOtherm 18.0.2, 3DS (COSMOtherm)
- oprogramowanie TURBMOLE (TURBOMOLE)
- oprogramowanie Codessa/AMPAC, SemiChem Inc. (Codessa/AMPAC)
- oprogramowanie Dragon 7 (Dragon 7)

OFEROWANE USŁUGI

- wspomagane komputerowo projektowanie związków chemicznych o zadanych właściwościach
- tworzenie baz danych fizykochemicznych i ich analiza metodami uczenia maszynowego
- symulacja/przewidywanie właściwości termodynamicznych mieszanin

WYBRANE PROJEKTY

- Fizyczne interpretacje efektu podstawnika na właściwości adeniny i jej międzycząsteczkowe oddziaływania (NCN, OPUS, 2017–2021)
- Wspomagane komputerowo projektowanie cieczy jonowych nowymi modelami QSPR uwzględniającymi różne wymiarowości reprezentacji chemicznej jonów, 2016/23/D/ST4/02467 (NCN, Sonata, 2017–2020)
- Fizyczne interpretacje efektu podstawnikowego (NCN, OPUS, 2014–2017)
- Projektowanie struktury cieczy jonowych metodami *in silico* – nowe korelacje i równania stanu oparte na idei udziałów grupowych, metoda COSMO-RS, 0347/IP3/2015/73 (MNiSW, Iuventus, 2014–2016)
- Ciecze jonowe jako nowoczesne i ekologiczne rozpuszczalniki cukrów, 2011/03/N/ST5/04781 (NCN, Preludium, 2012–2015)
- Strukturalne konsekwencje międzycząsteczkowych wiązań wodorowych w cząsteczkach zasad kwasów nukleinowych (KBN, 2010–2012)

