

Postdoc z grantu Sheng-2

Tytuł projektu: „Modelowanie, wspomagane przez dane doświadczalne, struktury zespołów statystycznych białek wewnątrznie nieuporządkowanych oraz ich asocjacji”

Kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Adam Liwo

Nazwa stanowiska: adiunkt naukowy (Postdoctoral Associate)

Wymagania w stosunku do Kandydata:

1. Stopień doktora nauk chemicznych, fizycznych, biologicznych lub pokrewnych.
2. Znajomość języka angielskiego na poziomie co najmniej umożliwiającym samodzielne czytanie prac naukowych w tym języku oraz podstawową komunikację.
3. Znajomość metody dynamiki molekularnej oraz doświadczenie w prowadzeniu symulacji i opracowywaniu ich wyników. Wskazana znajomość rozszerzeń dynamiki molekularnej (wymiana replik i hamiltonowska wymiana replik).
4. Znajomość metod eksperymentalnych określania struktur białek, w szczególności metody magnetycznego rezonansu jądrowego, co najmniej w zakresie wielkości dostępnych z tych pomiarów oraz ich użycia w modelowaniu struktur.
5. Doświadczenie w modelowaniu struktur białek przy użyciu dynamiki molekularnej z więzami eksperymentalnymi.
6. Umiejętność pracy na stacjach roboczych pod systemem UNIX na poziomie co najmniej średniozaawansowanego użytkownika, łącznie z umiejętnością pisania skryptów.
7. Znajomość co najmniej podstaw programowania w języku C, C++ lub FORTRAN.
8. Rzetelność i umiejętność samodzielnego rozwiązywania postawionych zadań naukowych.

Informacje o projekcie i opis zadań:

Projekt ma na celu opracowanie zorientowanej na zespoły statystyczne, wspomaganej danymi eksperymentalnymi metody dynamiki molekularnej (EODAMD; Ensemble Oriented Data Assisted Molecular Dynamics) określania dynamicznej struktury białek wewnątrznie nieuporządkowanych) IDP oraz białek o wielu stanach konformacyjnych (takich, jak np. chaperony molekularne). Metoda będzie oparta na symulacjach dynamiki molekularnej z hamiltonowską wymianą replik w gruboziarnistym polu siłowym UNRES opracowanym w laboratorium kierownika projektu. Więzy eksperymentalne będą nakładane na cały zespół konformacyjny poprzez ich uśrednienie względem replik i okien symulacyjnych. Jest to międzynarodowy projekt Sheng-2 realizowany we współpracy z grupą prof. Chuna Tanga z Uniwersytetu Pekńskiego. Pracownik zatrudniony w części projektu na stanowisku postdoca będzie miał następujące zadania:

1. Opracowanie metody obliczania przesunięć chemicznych protonów i atomów węgla-13 i azotu-15, jak również wartości RDC dla zadanej geometrii gruboziarnistej.
2. Implementacja pseudopotencjałów odpowiadających więzom z eksperymentów sieciowania chemicznego (CXMS) w pakiecie UNRES oraz testowanie tych potencjałów we wspomaganych danymi sieciowania chemicznego symulacjach białek o znanych strukturach z użyciem pakietu UNRES.

3. Opracowanie rozszerzonej metody dynamiki molekularnej z wymianą replik, z uśrednianiem więzów eksperymentalnych względem czasu i replik, w celu uwzględnienia eksperymentalnych więzów uśrednionych względem konformacji, oraz testowanie metody na białkach wielostanowych, dla których istnieją dane eksperymentalne.

Warunki zatrudnienia:

1. Umowa o pracę (pełen etat) na stanowisku adiunkta naukowego na rok z możliwością przedłużenia na następny rok.
2. Środki przewidziane na miesięczne wynagrodzenie: 10000 PLN brutto-brutto.
3. Orientacyjny czas rozpoczęcia: 1.06.2022

Dokumenty wymagane do aplikacji:

1. List motywacyjny.
2. Życiorys naukowy zawierający listę publikacji.
3. Kserokopia dyplomu lub odpisu dyplomu doktorskiego, dopuszczalny skan lub wersja elektroniczna.
4. Co najmniej 1 opinia z poprzedniego miejsca zatrudnienia lub opinia promotora pracy doktorskiej. Opinia promotora jest wymagana jeżeli Kandydat aplikuje o pozycję poddoktorską po raz pierwszy.

Dokumenty można złożyć osobiście w Biurze Dziekana Wydziału Chemii UG, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk, wysłać pocztą, adresując przesyłkę do prof. J.A. Liwo lub wysłać pocztą elektroniczną na adres adam.liwo@ug.edu.pl (preferowany sposób). W tym ostatnim przypadku list motywacyjny może być treścią listu elektronicznego, do którego proszę dołączyć skany dokumentów.

Po upływie terminu składania, złożone zgłoszenia zostaną poddane wstępnej selekcji a wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na rozmowę kwalifikacyjną, która odbędzie się w trybie zdalnym lub na Wydziale Chemii UG. O terminie rozmowy kwalifikacyjnej wybrani Kandydaci zostaną powiadomieni drogą mailową.

Wraz z wymaganymi dokumentami należy złożyć podpisaną klauzulę informacyjną, dotyczącą przetwarzania danych osobowych (do pobrania ze strony UG lub od kierownika projektu).

Pytania w sprawie oferty proszę kierować mailowo do prof. Liwo na adres adam.liwo@ug.edu.pl lub adam.liwo@gmail.com.

Termin zgłaszania upływa z dniem 28.02.2022