

# Konkurs na stanowisko postdoca (adiunkta naukowego) z projektu OPUS w Pracowni Modelowania Molekularnego Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego

## Tytuł projektu:

„Skorelowane oddziaływania średniopolowe przenoszone wzdłuż łańcucha polipeptydowego jako klucz do zrozumienia tworzenia struktury, dynamiki i allosterii białek oraz opartego o fizykę modelowania tychże”

**Kierownik projektu:** prof. dr hab. Józef Adam Liwo

**Nazwa stanowiska:** doktorant (stypendysta)

## Wymagania w stosunku do Kandydata:

1. Stopień doktora nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie chemia, fizyka, biologia, bioinformatyka, biotechnologia lub nauk/dyscyplin pokrewnych lub udokumentowana perspektywa uzyskania tego stopnia do czasu zatrudnienia. **Zgodnie z regulami Narodowego Centrum Nauki zatrudniania z projektów, data uzyskania stopnia doktora nie może być wcześniejsza niż 7 lat przed datą zatrudnienia finansowanego z projektu.**
2. Znajomość języka angielskiego na poziomie co najmniej umożliwiającym samodzielne czytanie prac naukowych w tym języku oraz podstawową komunikację.
3. Znajomość molekularnej mechaniki kwantowej, mechaniki statystycznej oraz metod chemii obliczeniowej. Wskazane doświadczenie w rozwijaniu pól siłowych.
4. Doświadczenie w prowadzeniu symulacji dynamiki molekularnej oraz analizy wyników symulacji. Wskazane jest doświadczenie obejmujące metadynamikę oraz rozszerzenia dynamiki molekularnej (metoda wymiany replik).
5. Znajomość metod statystycznej analizy danych. Wskazana znajomość metody analizy czynników głównych (PCA) oraz metod uczenia maszynowego.
6. Znajomość podstaw organizacji strukturalnej białek.
7. Umiejętność pracy na stacjach roboczych pod systemem UNIX na poziomie co najmniej średniozaawansowanego użytkownika. Wskazana jest również umiejętność programowania w językach C/C++/Fortran.
8. Solidność w pracy i umiejętność samodzielnego rozwiązywania problemów naukowych.

## Informacje o projekcie:

Białka są makromolekułami o wysoce zorganizowanej strukturze i współbieżnej dynamice, która przejawia się w komunikacji allosterycznej umożliwiającej np. transdukcję sygnałów oraz w ruchliwości będącej cechą motorów molekularnych. Ostatnio opracowano wysoce dokładne metody modelowania struktury białek oparte na sztucznej inteligencji, przede wszystkim AlphaFold, jednak ciągle jesteśmy dalecy od zrozumienia, w

jaki sposób współbieżność oddziaływań międzyatomowych powoduje tworzenie elementów struktur oraz współbieżne ruchy. Podejścia gruboziarniste w schemacie “od dołu do góry” (tj. wyprowadzenie oddziaływań między centrami gruboziarnistymi z oddziaływań międzyatomowych) mogą pomóc rozwiązać ten problem.

W naszej pracowni rozwijamy gruboziarnisty model UNRES białek, w którym łańcuch polipeptydowy jest przedstawiony w postaci śladu atomów węgla  $\alpha$  a centrami oddziaływań są scalone grupy peptydowe oraz scalone łańcuchy boczne. Model UNRES jest skuteczny w symulacjach struktury i dynamiki białek, umożliwiając 1000-krotnie rozszerzenie skali czasowej symulacji w stosunku do symulacji pełnoatomowych. Oparcie pola siłowego UNRES na fizyce oddziaływań umożliwia również interpretację jego składowych jako określonych z góry bloków oddziaływań, które organizują strukturę i dynamikę białek. W przypadku podejść pełnoatomowych takie wzory oddziaływań można wykryć jedynie prowadząc analizę wyników symulacji dynamiki molekularnej, stosując metodę czynników głównych lub podobne. Ostatnio odkryliśmy nowe wkłady gruboziarniste, odpowiadające długozasięgowym oddziaływaniom kolektywnym wzdłuż fragmentów rozciągniętych i helikalnych łańcuchów polipeptydowych.

Celem projektu jest (i) określenie roli dalekozasięgowych korelacji pomiędzy resztami aminokwasowymi dalekimi w sekwencji, które nie oddziałują ze sobą bezpośrednio w tworzeniu struktury trzeciorzędowej białek, (ii) wykorzystanie otrzymanych wyników do wzbogacenia gruboziarnistego pola siłowego UNRES w odpowiadające im wkłady do energii, które powinny polepszyć jego zdolność do modelowania skomplikowanych globalnych zwinięć białek, (iii) zbadanie wpływu wyżej wymienionych korelacji na dynamikę białek, w szczególności na komunikację allosteryczną oraz wyjątkową efektywność rotujących motorów molekularnych. Doktorant będzie uczestniczył w realizacji następujących zadań:

### **Zadania przypisane do stanowiska:**

1. Parametryzacja już wyprowadzonych wielokrotnych potencjałów torsyjnych oraz ich implementacja w modelu UNRES.
2. Wyprowadzenie wkładów do pola siłowego UNRES, odpowiadających korelacji wzdłuż sekwencji oraz analiza bazy danych białek (PDB) oraz bazy modeli białek AlphaFold w celu znalezienia tych korelacji oraz parametryzacja znalezionych wkładów korelacyjnych.
3. Kalibracja pola siłowego UNRES z nowymi wkładami.
4. Testowanie zdolności wzbogaconego pola siłowego UNRES do przewidywania skomplikowanych zwinięć białek, włączając to uczestnictwo w kolejnych ogólnościowych eksperymentach CASP przewidywania struktur białek.

### **Warunki zatrudnienia:**

1. Umowa o pracę (100% etatu) na okres 12 miesięcy, odnawialna na kolejne 12 miesięcy (maksymalny okres zatrudnienia 2 lata).
2. Wynagrodzenie brutto-brutto: 12000 PLN miesięcznie. Ta suma zawiera obowiązkowe składki na ubezpieczenie społeczne, w tym składkę pracodawcy.

3. Orientacyjna data rozpoczęcia zatrudnienia: 1.01.2025, możliwe wcześniejsze rozpoczęcie.

## **Dokumenty wymagane do aplikacji:**

1. List motywacyjny.
2. Życiorys naukowy zawierający listę publikacji.
3. A copy of Ph.D. diploma or documented proof that the applicant will obtain the Ph.D. degree (scan/electronic version acceptable).
4. Kopia dyplomu doktorskiego lub potwierdzenie, że Kandydat uzyska stopień doktora. Dopuszczalny jest skan lub wersja elektroniczna dokumentu.
5. Co najmniej jeden list rekomendacyjny od poprzedniego mentora. Kandydaci, którzy aplikują o stanowisko postdoka po raz pierwszy muszą uzyskać list rekomendacyjny od promotora rozprawy doktorskiej. **List rekomendacyjny musi być wysłany bezpośrednio przez osobę rekomendującą mailem na adres [adam.liwo@ug.edu.pl](mailto:adam.liwo@ug.edu.pl)**

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](mailto:adam.liwo@ug.edu.pl) (preferowany sposób). W tym ostatnim przypadku list motywacyjny może być treścią listu elektronicznego, do którego proszę dołączyć skany dokumentów.

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

Po upływie terminu składania, 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.

Pytania w sprawie oferty proszę kierować mailowo do prof. Liwo na adres [adam.liwo@ug.edu.pl](mailto:adam.liwo@ug.edu.pl) lub [adam.liwo@gmail.com](mailto:adam.liwo@gmail.com).

**Zgłoszenia powinny być złożone do 30.09.2024. Zgłoszenia nadesłane po tym terminie będą rozpatrywane, jeżeli wcześniej nie zostanie dokonany ostateczny wybór Kandydata.**