

# Konkurs na dwa (2) stanowiska doktoranta (stypendysty) z projektu OPUS w Pracowni Modelowania Molekularnego, Wydział 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 Kandydatów:

1. Tytuł zawodowy magistra chemii, fizyki, biologii, bioinformatyki, biotechnologii lub dziedzin pokrewnych lub udokumentowana perspektywa uzyskania tego tytułu do dnia 1.12.2024.
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 prowadzeniu symulacji dynamiki molekularnej oraz analizy wyników symulacji.
4. Znajomość metod statystycznej analizy danych. Wskazana znajomość metody analizy czynników głównych (PCA) oraz metod uczenia maszynowego.
5. Znajomość podstaw organizacji strukturalnej białek.
6. Umiejętność pracy na stacjach roboczych pod systemem UNIX na poziomie co najmniej średniozaawansowanego użytkownika. Wskazana jest również co najmniej podstawowa znajomość programowania w językach C/C++/Fortran.

## 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 alfa 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.

### **Zadania przypisane do stanowisk:**

1. Parametryzacja i implementacja nowych wkładów korelacyjnych do pola siłowego UNRES oraz kalibracja i testowanie pola siłowego z tymi wkładami.
2. Analiza baz danych Protein Data Bank oraz AlphaFold, w celu określenia wpływu długozasięgowych wkładów korelacyjnych propagujących się wzdłuż łańcucha polipeptydowego na tworzenie regularnych struktur w białkach.
3. Badanie kolektywnych ruchów wybranych białek metodą pełnoatomowej oraz gruboziarnistej dynamiki molekularnej (z użyciem modelu UNRES), w celu zidentyfikowania długozasięgowych gruboziarnistych wkładów korelacyjnych odpowiedzialnych za te ruchy.
4. Badanie dynamiki rotujących motorów molekularnych przy użyciu gruboziarnistej dynamiki molekularnej, wspomaganą przez pełnoatomową dynamikę molekularną, w celu znalezienia przyczyny ich zdolności przekształcania ruchów termicznych w ruch obrotowy oraz ich niezwykle wysokiej wydajności.

### **Warunki stypendium:**

1. Umowa stypendialna łącznie na okres do 4 lat.
2. Środki przewidziane na miesięczne stypendium: 5000 PLN brutto na okres do 4 lat.
3. Kandydat będzie słuchaczem Szkoły Doktorskiej Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego.
4. Przewidywany czas rozpoczęcia: 25.02.2025.

### **Dokumenty wymagane do aplikacji:**

1. List motywacyjny.
2. Życiorys naukowy zawierający listę publikacji.
3. Kopia dyplomu ukończenia studiów II stopnia, dopuszczalny skan lub wersja elektroniczna.
4. List rekomendacyjny od promotora pracy magisterskiej. Można dołączyć dodatkowe listy rekomendacyjne, np. od promotora pracy licencjackiej.

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.

**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** lub **adam.liwo@gmail.com**.

Zgłoszenia powinny być złożone do dnia 1.12.2024. Zgłoszenia nadesłane po tym terminie będą rozpatrywane, jeżeli wcześniej nie zostanie dokonany ostateczny wybór dóch Kandydatów.