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"

Numer umowy: UMO-2023/51/B/ST4/01218

Kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Adam Liwo

Nazwa stanowiska: postdoc (adiunkt naukowy)

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 regułami Narodowego Centrum Nauki zatrudniania z projektów, data uzyskania stopnia doktora nie może być wcześniejsza niż 12 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 α 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 łaćuchów polipeptydoweych.

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. Identyfikacja kolektywnych ruchów, odpowiedzialnych za komunikację allosteryczną, w wybranych białkach przy pomocy pełnoatomowych symulacji dynamiki molekularnej oraz analizę wyników tych symulacji metodą czynników głównych oraz metodami uczenia maszynowego.
2. Identyfikacja kolektywnych ruchów białek badanych metodami pełnoatomowej dynamiki molekularnej w ramach zadania 1 przy użyciu symulacji gruboziarnistej w polu siłowych UNRES i określenie wkładu członów korelacyjnych pola siłowego do ruchów kolektywnych i komunikacji allosterycznej.
3. Badanie kolektywnych ruchów zachodzących w wybranych rotujących motorach molekularnych poprzez symulacje gruboziarnistej dynamiki molekularnej z użyciem pola UNRES, zawierającego nowe wkłady korelacyjne oraz pomocniczych pełnoatomowych symulacji dynamiki molekularnej.

Warunki zatrudnienia:

1. Umowa o pracę (100% etatu) na okres 12 miesięcy, odnawialna na kolejne 12 miesięcy (maksymalny okres zatrudnienia 2 lata).
2. Wynagrodznie brutto-brutto: 12000 PLN miesięcznie. Ta suma zawiera obowiązkowe składki na ubezpieczenie społeczne, w tym składkę pracodawcy.
3. Orientacyjna data rozpoczęcia zatrudnienia: 1.07.2026 lub później, nie później niż 1.01.2027.

Dokumenty wymagane do aplikacji:

1. List motywacyjny.
2. Życiorys naukowy zawierający listę publikacji.
3. Kopia dyplomu doktorskiego lub potwierdzenie, że Kandydat uzyska stopień doktora. Dopuszczalny jest skan lub wersja elektroniczna dokumentu.
4. 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**

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

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, 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**.

Zgłoszena powiny być złożone do 30.04.2026. Zgłoszenia nadesłane po tym terminie będą rozpatrywane, jeżeli wcześniej nie zostanie dokonany ostateczny wybór Kandydata.