

Konkurs na stanowisko doktoranta (stypendysty) z projektu Sheng-2 (1)

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

Kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Adam Liwo

Nazwa stanowiska: doktorant

Wymagania w stosunku do Kandydata:

1. Tytuł zawodowy magistra chemii, fizyki, biologii, biotechnologii lub dziedzin pokrewnych.
2. Znajomość języka angielskiego na poziomie co najmniej umożliwiającym samodzielne czytanie prac naukowych w tym języku oraz podstawową komunikację.
3. Znajomość metod symulacyjnych w chemii, w szczególności metody dynamiki molekularnej. Wskazane doświadczenie w prowadzeniu symulacji dynamiki molekularnej.
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. 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 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 wewnętrznie 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 Pekińskiego. Stypendysta będzie uczestniczył w realizacji następujących zadań:

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. Określanie zespołów konformacyjnych białek wewnętrznie nieuporządkowanych oraz określenie wpływu czynników środowiskowych, w tym pH, obecność kationów, itp., na ich dynamikę konformacyjną.

Warunki stypendium:

1. Umowa stypendialna na okres 12 miesięcy, odnawiana co 12 miesięcy, łącznie na okres do 3 lat.
2. Środki przewidziane na miesięczne stypendium: 5000 PLN brutto na okres do 3 lat. Ta suma zawiera obowiązkowe składki na ubezpieczenie społeczne.
3. Orientacyjny czas rozpoczęcia: 1.03.2022

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.

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.

Termin skadania aplikacji upływa z dniem 31.01.2022.